

# **Ontwikkeling van 2D en 3D Monte Carlo Algoritmes om Ionentransport te Simuleren in Isotrope en Anisotrope Media**

Stefaan Vermael

Promotor: prof. Dr. ir. K. Neyts

Proefschrift ingediend tot het behalen van de graad van  
Doctor in de Toegepaste Wetenschappen

Vakgroep Elektronica en Informatiesystemen  
Voorzitter: prof. dr. ir. J. Van Campenhout  
Faculteit Toegepaste Wetenschappen  
Academiejaar 2003-2004





# Dankwoord

Ik wil vooral mijn dank betuigen aan mijn promotor, Prof. Kristiaan Neyts, die mij deze kans gegeven heeft. Zijn enthousiasme over alle wetenschappelijke onderwerpen was voor mij niet alleen een goed voorbeeld, maar zorgde ook voor een aangename sfeer. Ook Prof. Jan Van Campenhout wil ik als voorzitter van de vakgroep Elektronica en Informatiesystemen bedanken voor de mogelijkheden die me geboden werden.

De collega's van de LCD-onderzoeksgroep mogen uiteraard niet ontbreken. De oud-collega's Koenraad, Herbert, Fatiha, Hua en Koen om me wegwijs te maken in de modellen en meettechnieken. De huidige collega's Chris, Artur, Goran, Jeroen, Filip en Hans voor de leuke tijden in onze bureau. Piepschuim heeft toch een extra dimensie gekregen ondertussen. Hen wens ik veel succes toe met het verdere verloop van hun onderzoek.

Speciaal dank ik ook de onderzoekers van Philips Research Laboratories in Eindhoven, met wie ik de eer had te kunnen samenwerken. Special regard for the Optical System and Devices Group of University College London (UCL) for the pleasant co-operation.

Ik wil mijn ouders bedanken, die mij lieten studeren aan Universiteit Gent en mij gesteund hebben in de moeilijke tijden als student. Ook mijn vrienden mogen niet ontbreken in dit lijstje.

Als laatste wil ik Elke bedanken, voor alles.



# Inhoudsopgave

1	Vloeibare Kristallen en ladingstransport	1
1.1	Vloeibare Kristallen	1
1.2	Een vloeibaar-kristalbeeldscherm	7
1.2.1	De opbouw	7
1.2.2	De elastische energiedichtheid	8
1.2.3	De oppervlakte energiedichtheid	10
1.2.4	De elektrische energiedichtheid	11
1.2.5	De minimale energie	13
1.3	De optische werking	15
1.4	Elektronische aansturing	20
1.4.1	Passieve matrix	21
1.4.2	Actieve matrix	23
1.5	Ionentransport en het effect op vloeibare kristallen	25
1.6	Eéndimensionale benadering van ionentransport	
1.6.1	Ruimteladingslimiet	28
1.6.2	Bewegingsvergelijking van het ionentransport	28
1.6.3	Limietgevallen bewegingsvergelijking	31
1.6.3.1	Beweging in de bulk bij een constant veld	
1.6.3.2	Evenwichtssituatie bij een constant veld nabij een wand	36
1.6.3.3	Concentratieverdeling bij een constant veld	37
1.6.4	Invloed op het elektrisch veld	38
1.6.5	Elektrische stroom	41
1.7	Doelstelling van dit doctoraat	42
2	Monte Carlo algoritme in de continue ruimte (1D)	45
2.1	De beweging van geladen deeltjes	45
2.2	Monte Carlo	48
2.3	Meta-ionen	50
2.4	De verschillende regimes	51
2.4.1	Drift en diffusie ver van de wand	52

2.4.2	Steady state oplossing	52
2.4.3	Diffusie vanaf een wand	54
2.5	De overgangen tussen de regimes en het selectie criterium	55
2.6	Implementatie deeltjestransport	59
2.6.1	De Monte Carlo Estimatorfunctie	59
2.6.1.1	De normale verdeling	60
2.6.1.2	De exponentiële verdeling	62
2.6.2	Het transport per regime	63
2.7	Problemen van deze benadering	64
2.8	De nauwkeurigheid	66
2.9	De terugkoppeling van de ladingsdistributie	69
2.10	De vergelijking met het finite difference programma	70
2.11	Besluit	72
3	Monte Carlo algoritme in de continue ruimte (2D)	75
3.1	Het coördinatenstelsel en de rekenruimte	76
3.2	De director en de potentiaal	77
3.2.1	GiD en de definitie van de rekenstructuur	77
3.2.2	Van potentiaal naar elektrische veld	79
3.2.2.1	Numerieke afgeleiden	79
3.3	Tweedimensionale snelheid	82
3.4	Diffusie in 2D	84
3.4.1	De transformatiematrix	85
3.4.2	Driedimensionale diffusie	87
3.4.3	Diffusie vanaf de wand	88
3.5	Het exponentiële regime	89
3.5.1	Loodrecht op de wand	90
3.5.2	Evenwijdig met de wand	91
3.6	De nauwkeurigheid	92
3.6.1	Diffusiealgoritme	92
3.6.2	Het elektrische veld	93
3.7	De geïnduceerde stroom	96
3.8	Toepassing: De In-Plane-Switching cel	98
3.9	Besluit	105
4	Monte Carlo ionentransport op een onregelmatige mesh (3D)	107
4.1	Het 3D LC-model	108
4.1.1	Een onregelmatige mesh	108
4.2	Het elektrische veld	112
4.3	Het ionentransport in de bulk door drift	114
4.4	Reductie van de vrijheidsgraden in drift	121
4.4.1	Een grensvlak	121

4.4.2	Twee grensvlakken	123
4.5	Diffusie: theorie	125
4.5.1	De individuele overgangswaarschijnlijkheid	126
4.5.2	De totale overgangswaarschijnlijkheid	130
4.5.3	Poisson diffusie	132
4.5.4	Correcte diffusie	134
4.6	Implementatie parameterwaarden	136
4.6.1	Gedeelde en bewaarde parameterwaarden	138
4.6.1.1		138
4.6.1.2	Volume voor een punt	138
4.6.1.3	Inverse matrix hypervlak	139
4.6.1.4	De ruimtehoed	140
4.6.2	Niet bewaarde parameterwaarden	142
4.7	Periodieke randvoorwaarden	143
4.8	De nauwkeurigheid	144
4.8.1	Diffusie	144
4.8.2	Eendimensionale simulatie	146
4.9	Toepassing: de double domain IPS	149
4.10	Discussie en besluit	153
5	Toepassing: Elektroforetische inkt	155
5.1	Inleiding E-ink	155
5.2	Basistheorie elektroforese	157
5.3	Concentratielimiet dichtste bolstapeling	159
5.3.1	Dichtste bolstapeling	159
5.3.2	Postprocessing concentratielimiet	160
5.4	Kubelka-Munk reflectietheorie	164
5.5	Het reflectiespectrum	168
5.5.1	CIELAB	169
5.6	Eendimensionale simulatie	173
5.7	Besluit	180
6	Besluit	181
6.1	Verwezelijkingen	181
6.2	Toekomstperspectieven	183





## Lijst van tabellen

1-1	Overzicht van de gegevens voor het vloeibaar-kristalmengsel ZLI 4792	14
2-1	De parameterwaarden om de nauwkeurigheid van het 1D MC algoritme te testen	66
2-2	De parameterwaarden om de stroomberekening van het 1D MC algoritme te testen	70
3-1	De parameterwaarden verplaatsing $\delta$ -distributie in anisotroop medium met constant veld	92
3-2	De parameter waarden om de nauwkeurigheid van het elektrische veld te testen	94
3-3	De parameter waarden van de IPS-simulatie	99
4-1	De parameterwaarden verplaatsing $\delta$ -distributie in isotroop medium met constant veld	119
4-2	De parameterwaarden $\delta$ -distributie in isotroop medium, enkel onderhevig aan diffusie (1D)	134
4-3	De parameterwaarden $\delta$ -distributie in isotroop medium, enkel onderhevig aan diffusie (2D)	135
4-4	De parameterwaarden van de DD-IPS simulatie	152
5-1	De parameterwaarden van de elektroforetische cel simulatie.	173



# Lijst van figuren

1.1	Enkele voorbeelden van nematische vloeibare-kristalmoleculen	4
1.2	Bepaling van de director door de tilthoek $\theta$ en de twisthoek $\varphi$ .	5
1.3	Het verloop van de Ordeparameter $S$ vs. de Temperatuur en de onderverdeling van de verschillende fasen.	6
1.4	De opbouw van een vloeibaar-kristalbeeldscherm.	8
1.5	Illustratie de drie vervormingen in vloeibaar-kristal	9
1.6	Evenwichtsdirector-oriëntaties , opgesplitst in twist en tilt, voor verschillende spanningen.	14
1.7	Illustratie bij de optische werking van een getwist-nematisch vloeibaar-kristalbeeldscherm.	16
1.8	Schematische transmissie-karakteristiek van een vloeibaar-kristalbeeldscherm	17
1.9	Passieve-Matrix (links) en Actieve-Matrix (rechts) aansturing van een vloeibaar-kristalbeeldscherm.	24
1.10	Verandering van de diëlektrische verplaatsing onder invloed van geladen deeltjes in een vloeibaar-kristalbeeldscherm.	25
1.11	Illustratie van Image Sticking op de transmissiekarakteristiek.	27
1.12	Veralgemening vloeibaar-kristalbeeldpunt, voorgesteld door capaciteiten.	28
1.13	Transport van een uniforme verdeling in de bulk.	35
1.14	De exponentiële evenwichtsverdeling van geladen deeltjes nabij een wand.	36
1.15	Algemene situatie bij een constant veld.	37
1.16	Conventie opbouw vloeibaar-kristalcel voor berekening elektrisch veld.	38
2.1	Voorstelling van de werkingsgebieden van de drie regimes.	57
2.2	Schematisch voorstelling van de werking van een estimator.	60
2.3	De vergelijking van de cumulatieve van de standaard normale verdeling $F(x/\sigma)$ met de gekozen approximatie.	61
2.4	Illustratie van een veelvoorkomend probleem aan de wand.	65
2.5	Vergelijk tussen de gesimuleerde verdelingen met de analytische oplossing.	66
2.6	De concentratieverdeling van de positieve ionen.	68
2.7	Vergelijking tussen het FD en het MC algoritme voor het concentratieverloop en het elektrische veld.	71
2.8	Stroomberekening voor het FD algoritme en het MC algoritme.	72

3.1	Coördinatenstelsel voor de tweedimensionale berekening.	76
3.2	Enkele voorbeelden van rekenstructuren.	78
3.3	Van de driehoekige elementen uit gelijkgespatieerde intervallen.	79
3.4	De snelheidsvector als raaklijn van een veldlijn in een IPS cel.	83
3.5	Euler transformatiehoeken directorrichting	86
3.6	Puntspiegeling als correcte voor diffusie vanaf de wand .	89
3.7	Distributie van 6000 negatieve meta-ionen na simulatie van het transport in een anisotroop, homogeen medium.	93
3.8	Vergelijking tussen de genormaliseerde veldverdelingen van MC met 3-punts afgeleide, MC met 5-punts afgeleiden en FD	94
3.9	Vergelijking tussen de genormaliseerde concentratieverdeling van MC met 3punts afgeleide, 5-punts afgeleide en FD.	95
3.10	Capacitieve structuur met lading $Q'$ .	97
3.11	Vergelijking stroomberekening van het 2D Monte Carlo Algoritme met het 1D FD algoritme.	98
3.12	Schema IPS-structuur.	100
3.13	Simulatieresultaten voor de IPS-structuur met lage ion concentratie.	101
3.14	Tijdsequentie van simulatieresultaten voor de IPS-structuur met hoge ion concentratie.	102
3.15	Optisch transmissie van de IPS-structuur, gezien door gekruiste polarisatoren,	104
4.1	Het opvullen van een rekenstructuur met elementen.	109
4.2	Mesh informatie in ASCII-bestand.	110
4.3	De elementen en de eerste naburen van een punt in 2D.	111
4.4	Ontbinding van de snelheidsvector in het assenstelsel van het 2D element.	115
4.5	Constructie van een gewogen randomnesschema.	117
4.6	Verschillende mogelijk trajecten voor een meta-ion in een tijdstap $\Delta t$ .	118
4.7	De 2D testmesh	118
4.8	Simulatie resultaten numerieke diffusie bij drift	119
4.9	Illustratie numerieke diffusie bij drift	120
4.10	De projectie van de snelheidsvector op het grensvlak.	123
4.11	De snelheidsvector wijst in een ribbe	124
4.12	De constructie van $\psi_j$ in een 2D illustratie	128
4.13	Een 2D illustratie bij het volume van een punt $i$ .	129
4.14	Schijnbare dubbele compensatie voor diffusie van een wand.	131
4.15	bepaling van een transitie bij Poisson diffusie.	133
4.16	1D histogram volgens z-as, vergelijk tussen analytische oplossing en simulatieresultaten.	135
4.17	Simulatieresultaat na 150 ms, invloed van de anisotropie en de tijdstap.	136
4.18	Definities om het oppervlak van een sferische driehoed te berekenen.	140
4.19	Constructie om de ruimtehoek te berekenen.	141
4.20	Creatie van prismavormige volume-elementen om periodieke	

	randvoorwaarden in de mesh te creëren.	143
4.21	Diffusietest in een kubus.	145
4.22	Vergelijking einddistributie nabij de interface	147
4.23	Vergelijking ladingsdistributie tussen 1D en 3D na 30 ms.	147
4.24	Lay-out van een Double-Domain-In-plane-Switching structuur.	150
4.25	De directororiëntatie en de potentiaalverdeling voor de DD-IPS in de beginsituatie.	150
4.26	De directororiëntatie en de potentiaalverdeling voor de DD-IPS met lage ionenconcentratie, na 250 ms.	151
4.27	De directororiëntatie en de potentiaalverdeling voor de DD-IPS met hoge ionenconcentratie, na 250 ms	151
5.1	Werkingsprincipe van een elektroforetisch systeem.	156
5.2	De concentratieberekening voor de dichtste bolstapeling.	159
5.3	Illustratie van het postprocessing algoritme om de concentratielimiet te waarborgen.	161
5.4	Conventies voor de Kubelka-Munk reflectietheorie.	164
5.5	Standaard CIE (1931) 2° kleurafstemfuncties.	170
5.6	Kleursysteem van de CIELAB standaard	172
5.7	De verdeling van de witte pigmentdeeltjes tijdens de transitie van de zwarte naar witte toestand	175
5.8	Concentratieverdeling van de witte pigmentdeeltjes samen met het elektrische veld aan het einde van de negatieve puls.	177
5.9	Concentratieverdeling van de witte pigmentdeeltjes samen met het elektrische veld bij het begin van de positieve puls	178
5.10	De gesimuleerde reflectie van de transitie van zwart naar wit.	179



## Hoofdstuk 1

# Vloeibare Kristallen en ladingstransport

### 1.1 Vloeibare kristallen

Materialen worden over het algemeen ingedeeld volgens hun aggregatietoestand: vast, vloeibaar of gasvormig. Laten we even de voornaamste kenmerken van die 3 toestanden overlopen.

Bij vaste stoffen zijn de moleculen netjes geordend in een (kristal)rooster, dwz. dat ze op een vaste plaats liggen en in een bepaalde richting wijzen. Laten we de temperatuur toenemen, dan zal de vaste stof op een gegeven moment beginnen te smelten. Dan krijgen we een vloeistof. In vloeistoffen bewegen alle moleculen vrij rond (ze vloeien), ze hebben geen vaste plaats en geen vaste richting, maar ze blijven wel bij elkaar. Verhogen we de temperatuur nog meer, dan verdampt de vloeistof en worden de moleculen gasvormig. Ze bewegen vrij door elkaar en verspreiden zich over de ruimte. Ze blijven niet meer bij elkaar zoals vloeistoffen.

Sommige materialen blijken ook tussenfasen, tussen vast en vloeibaar, te bezitten. Deze materialen bezitten in die tussenfasen zowel vloeistofeigenschappen (beweegbaarheid van de moleculen) als vaste-stofeigenschappen (dubbelbreking). Wij noemen die materialen *mesogene stoffen* of *vloeibare kristallen* (Eng. liquid crystal; LC). Vloeibare kristallen zijn over het algemeen langwerpige of schijfvormige moleculen.

Om dit duidelijker te illustreren vertrekken we van de vaste kristallijne fase. In de vaste fase zijn de massamiddelpunten van de moleculen geordend in een driedimensionaal periodiek rooster en is zowel positionele als oriëntationele ordening aanwezig. Bij de overgang van de vaste toestand naar de vloeibaar-kristallijne toestand (bij het smeltpunt) verliest het materiaal zijn positionele ordening. Het behoudt echter wel de oriëntationele ordening. De langwerpige moleculen lijnen zich op, maar kunnen onderling vlot bewegen ten opzichte van elkaar. Verhogen we de temperatuur nog verder, dan gaat de vloeistof-kristalfase tenslotte over in de isotrope fase. Dit overgangspunt noemt men het transparantiepoint (Eng. clearing point). Bij de overgang naar de isotrope fase verdwijnt de oriëntationele ordening. Waardoor de dubbelbreking ophoudt te bestaan en de vloeistof, bekeken tussen gekruiste polarisatoren, optisch helder wordt.

Deze uitleg klopt slechts voor één gedeelte van de vloeibaar-kristalfasen namelijk de *nematische vloeibaar-kristalfase*. In vele gevallen treden meerdere intermediaire toestanden op, waarbij naast oriëntationele orde ook positionele orde optreedt: de moleculen zijn gerangschikt in lagen (zie ook figuur 1.3). Deze toestand noemt men de *smectische fase*.

De eenvoudigste smectische fase heet smectisch A (SmA), de oriëntatie van moleculen is loodrecht op de lagen maar kunnen wel om hun as roteren. Bij de smectische C-fase (SmC) maken de

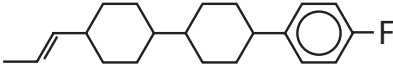
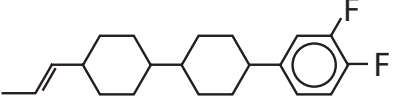
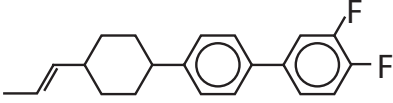
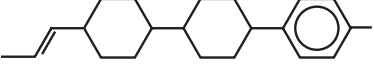
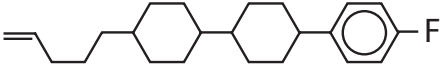


moleculen een hoek  $\theta$  met de normaal van de laag. De moleculen bevinden zich dan op de smectische kegel waarvan de as loodrecht staat op de laag. Indien de moleculen van laag tot laag langzaam ronddraaien op deze kegel ontstaat een helix, men spreekt van chiraal smectisch ( $\text{SmC}^*$ ).

Met de  $\text{SmC}^*$ -fase kunnen beeldschermen gemaakt worden door de helix te ontwinden. Dit kan gebeuren door een strikte keuze van de parameters (dikte vloeibaar-kristal, keuze aligneringslaag) en resulteert in twee stabiele toestanden [1]. Liggen de moleculen in een laag parallel met de moleculen van de andere lagen, dan spreken we ferro-elektrische vloeibare-kristallen. Het eerste ontwerp van dit type werd gemaakt door Lagerwall en Clark [2]. Liggen de moleculen van laag tot laag in tegengestelde zin op de smectische kegel, dan is dit een antiferro-elektrisch vloeibaar-kristal.

Onderzoek naar vloeibaar-kristalbeeldschermen met smectische materialen is volop aan de gang. Vooral de hoge schakelsnelheid is een belangrijke troef. De nadelen zijn het beperkte temperatuurbereik en problemen met de alignering van de moleculen [3].

Het grootste aantal vloeibaar-kristalbeeldschermen wordt echter gemaakt met nematische vloeibare kristallen. De moleculen zijn opgebouwd uit een langwerpige kern, bestaande uit aromatische en/of niet-aromatische koolstofringen, waarop aan één uiteinde een koolstofketen bevestigd is en aan het andere uiteinde een polaire groep [4, 5, 6] (figuur 1.1).

	$T_{\text{Nematic-Isotropic}}$	$T_{\text{Crystal-Smectic}}$
	194 °C	105 °C
	159 °C	49 °C
	134 °C	98 °C
	214 °C	74 °C
	130 °C	66 °C

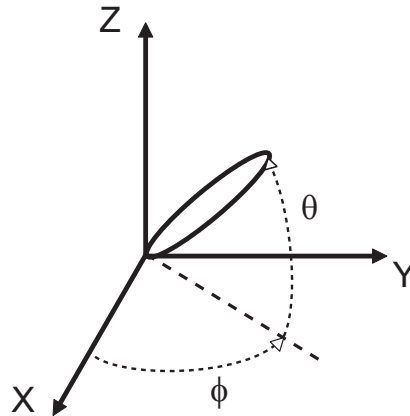
**Figuur 1.1: Enkele voorbeelden van nematische vloeibare-kristalmoleculen.**

Het is de polaire groep die een permanent dipoolmoment in de molecule introduceert. Dit zorgt voor de vereiste diëlektrische anisotropie  $\Delta\epsilon$  van de vloeibaar-kristalmoleculen ( $\Delta\epsilon = \epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}$ ). Ondanks het polaire karakter van de moleculen heeft de nematische fase macroscopisch gezien geen permanente polarisatie omdat de dipoolmomenten gecompenseerd worden door verschillende mogelijke oriëntaties. De plaats van de polaire groep in de molecule beïnvloedt het teken van  $\Delta\epsilon$  (gelegen volgens de lange as:  $\Delta\epsilon$  positief; gelegen loodrecht erop:  $\Delta\epsilon$  negatief). Het vervangen van de polaire groep door een niet-polaire keten kan  $\Delta\epsilon$  verkleinen. Deze opbouw van de molecule zorgt ook voor de optische anisotropie  $\Delta n$  in het zichtbare frequentiegebied ( $\Delta n = n_{//} - n_{\perp}$ ). Deze parameter is verantwoordelijk voor de optische werking van elke soort vloeibaar-kristalbeeldschermen en daarom ook cruciaal.

Commercieel beschikbare nematische vloeibaar-kristalmaterialen moeten voldoen aan zeer strenge eisen. De voornaamste eis is dat de belangrijkste karakteristieken ( $\Delta\epsilon$ ,  $\Delta n$ , ...) zo weinig mogelijk veranderen in een zo groot mogelijk temperatuursgebied. En daarnaast moet de viscositeit van de vloeistof voldoende laag zijn om een grote reactiesnelheid toe te laten. Over het algemeen maakt men gebruik van mengsels om deze voorwaarden te bewerkstelligen [7].

Bij nematische vloeibare-kristalmengsels treedt er dus oriëntationele ordening op en nauwelijks positionele ordening. De moleculen echter liggen statistisch gezien min of meer in een bepaalde richting. Deze gemiddelde richting noemen we de *director*  $\vec{n}(\vec{r})$ . De director wordt volledig bepaald door twee hoeken, de *tilthoek*  $\theta$  en de *twisthoek*  $\phi$  ten opzichte van een orthonormaal assenstelsel (1.1) (figuur 1.2). Het orthonormaal assenstelsel is gedefiniëerd in figuur 1.2; de Z-richting is loodrecht op de glasplaten, de X- en Y-richtingen liggen dan evenwijdig met het glas (zie ook verder bij opbouw beeldscherm).

$$\vec{n}(\vec{r}) = (\cos \theta(\vec{r}) \cos \phi(\vec{r}), \cos \theta(\vec{r}) \sin \phi(\vec{r}), \sin \theta(\vec{r})) \quad (1.1)$$

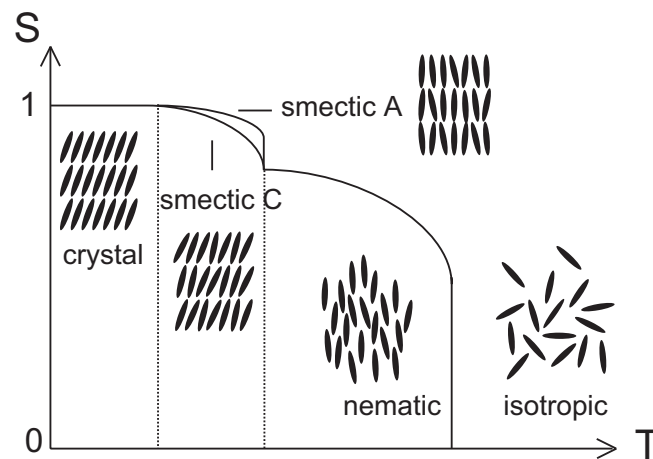


**Figuur 1.2:** Bepaling van de director door de tilthoek  $\theta$  en de twisthoek  $\phi$ .

De director is de gemiddelde richting van een groot aantal moleculen rond de positie  $\vec{r}$ , het is een macroscopische parameter. We weten al dat nematische mengsels geen permanent dipoolmoment hebben, hierdoor veronderstellen we dat de director noch kop noch staart heeft en de richtingen  $\vec{n}$  en  $-\vec{n}$  niet te onderscheiden zijn.

Lokale afwijkingen (op moleculaire schaal) t.o.v. de director worden veroorzaakt door thermische agitatie van de moleculen. De mate van ordening wordt bepaald door de dimensieloze ordeparameter  $S$  (1.2) [8, 9].

$$S = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle \quad (1.2)$$



**Figuur 1.3: Het verloop van de Ordeparameter  $S$  vs. de Temperatuur en de onderverdeling van de verschillende fasen.**

Hierin stelt  $\theta$  de hoek voor tussen de lange as van een lokale molecule en de director. De bewerking  $\langle \rangle$  neemt het gemiddelde over een groot aantal moleculen [10].  $S = 1$  betekent volledige orde,

zoals bij een vaste stof.  $S = 0$  is de totale afwezigheid van orde, zoals bij een vloeistof of een gas. De ordeparameter hangt bijgevolg af van de temperatuur, waardoor men de verschillende fasen (kristallijn, smectisch, nematisch, isotroop) kan onderscheiden (figuur 1.3).  $S$  kan gemeten worden door de diamagnetische anisotropie te bepalen of de elektrische polariseerbaarheid van een vloeibaar-kristalmateriaal in vergelijking met de kristallijne stof [8].

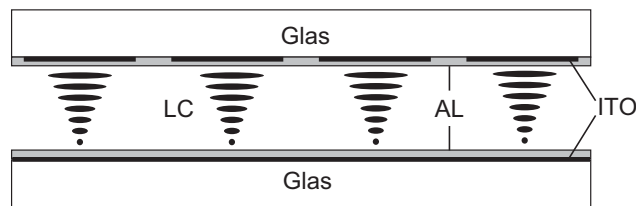
In dit proefschrift zal enkel aandacht worden besteed aan *nematische vloeibare kristallen*.

## 1.2 Een Vloeibaar-kristalbeeldscherm

### 1.2.1 De opbouw

Wanneer de vloeibaar-kristalmoleculen niet worden verstoord door uitwendige invloeden, vertoont de director een vaste oriëntatie in de ruimte. Het vloeibare kristal bevindt zich dan onder condities die energetisch gezien de voordeligste situatie is. Om een beeldscherm te maken, zit het vloeibaar-kristalmateriaal in een dunne laag gevangen van enkele micrometer dik. Om de dunne laag te maken, gebruiken we twee glasplaten met transparante elektrodes, over het algemeen wordt Indium-Tin-Oxide (ITO) gebruikt. Door gebruik te maken van *spacers* (glazen bolletjes of staafjes met een diameter van enkele micrometer) worden de platen op een afstand, bepaald door de diameter van de spacers, van elkaar gehouden. Op de transparante geleider legt men een dunne aligneringslaag. De aligneringslaag (AL) zal randvoorwaarden opleggen aan de moleculen nabij de glasplaten en fungeert ook als isolatorlaag om het vloeibare kristal (LC) niet in direct contact te brengen met de elektrodes. De opbouw van een beeldscherm kunnen we zien in

figuur 1.4. De volgorde van de lagen is: Glas, ITO, AL, LC, AL, ITO, Glas.



**Figuur 1.4: De opbouw van een vloeibaar-kristalbeeldscherm.**

In het beeldscherm wordt de oriëntatie van de director bepaald door het evenwicht van de elastische, de oppervlakte- en de elektrische krachten. Wordt er een spanning  $V$  over de elektrodes gezet, dan zullen de elektrische krachten de director trachten te oriënteren volgens het elektrische veld. Dit effect wordt echter tegengewerkt door elastische krachten in de vloeibaar-kristallaag en de opgedrongen alignering van de moleculen aan de randen.

Om de werking van een vloeibaar-kristalbeeldscherm te kunnen begrijpen, zullen we verschillende energiebijdragen verder uitwerken.

### 1.2.2 De elastische energiedichtheid

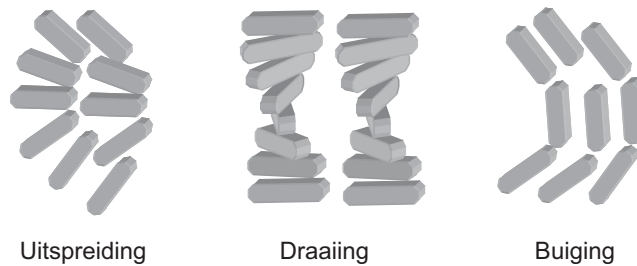
Door de vloeibaar-kristallaag randvoorwaarden op te leggen, hetzij door de aligneringslaag, hetzij door een elektrisch veld op te wekken in de laag, verstoort men het natuurlijk directorprofiel. Men verhoogt dus de elastische energie van het systeem. De elastische energiedichtheid  $f_{elast}$ , van een chiraal-nematisch fase, die met deze vervorming gepaard gaat, wordt beschreven door de Oseen-Frank vergelijking (1.3) [11, 12].

$$f_{\text{elast}} = \frac{1}{2} \left( K_1 (\nabla \cdot \vec{n})^2 + K_2 (\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} + q_0)^2 + K_3 (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2 \right) \quad (1.3)$$

Deze beschrijving is een continuümtheorie, analoog aan de klassieke elasticiteitstheorie van de vaste stof, dit omzeilt een aanpak gesteund op microscopische theorieën.

In (1.3) zijn  $K_1$ ,  $K_2$  en  $K_3$  de elasticiteitsconstanten voor de respectievelijke vervormingen door uitspreiding (splay), draaiing (twist) en buiging (bend). De bijdrage  $q_0$  in de draaiingsterm geldt voor chiraal-nematische vloeibare-kristalmengsels. In dit type vloeibaar kristal maakt de director een natuurlijke schroefbeweging met speed  $p = 2\pi/q_0$ . Figuur 1.5 illustreert de drie verschillende vervormingen.

De waarde van  $K_1$  is ongeveer 10 pN, voor  $K_2$  en  $K_3$  geeft men doorgaans de verhouding tot  $K_1$ . Typische waarden voor  $K_2/K_1$  liggen tussen 0.5 en 0.6, voor  $K_3/K_1$  varieert dat tussen 0.6 en 2. De waarden houden verband met de verhouding tussen de moleculaire interactie-energieën ( $\sim 0.1$  eV) tot de moleculaire grootte ( $\sim 20$  nm) [13].



**Figuur 1.5: Illustratie van de drie vervormingen in een vloeibaar kristal.**

### 1.2.3 De oppervlakte energiedichtheid

De aligneringslaag is over het algemeen een polyimide die een preferentiële twist- en tiltrichting oplegt aan de director nabij de aligneringslaag. De verankering van de director aan het oppervlak van de aligneringslaag heeft een grote invloed op de optische werking van het beeldscherm. Door de voorkeursrichting van de twee aligneringslagen over  $90^\circ$  te draaien, introduceert men in de vloeibare-kristallaag een wenteltrapstructuur (figuur 1.4). De ontdekking van dit getwiste nematische effect door Schadt en Helfrich was de belangrijkste schakel in de ontwikkeling van het succesvolle *getwist nematisch vloeibaar-kristalbeeldscherm* [14].

Men krijgt de preferentiële twist- en tiltrichting door de aligneringslaag te “rubben”, d.i. over het oppervlak wrijven met een fluwelen doek. In de realiteit is de verankering van de moleculen nooit perfect. De verankerde moleculen worden onderworpen aan elektrische krachten die hen uit de voorkeursrichting doen afwijken. Elke uitwijking ten opzichte van de preferentiële richting kost energie. De oppervlakteënergie  $F_s$  bestaat daarom uit twee bijdragen: een azimuthale term, een energieverhoging ten gevolge van de draaiing (twist) van de director in het oppervlak en een tilt-term, een energieverhoging ten gevolge van het tilten van de director uit het vlak.

We beschrijven de oppervlakte-energie via de Rapini-Papoular uitdrukking (1.4) [15]:

$$f_s = \frac{1}{2} W (\vec{n}_s \cdot \vec{e}) \quad (1.4)$$

Met  $\vec{n}_s$  de oppervlakedirector,  $\vec{e}$  de preferentiële richting en  $W$  de verankerings-energieconstante. Als de afwijkingen in de buurt van



de minimale energie klein zijn, kunnen we (1.4) benaderen door (1.5) te gebruiken.

$$f_s = \frac{1}{2} W^\varphi \cdot \sin^2(\varphi(0) - \varphi_s) \cdot \cos \theta(0) + \frac{1}{2} W^\theta \cdot \sin^2(\theta(0) - \theta_s) \quad (1.5)$$

$$F_s = \int f_s dS \quad (1.6)$$

In (1.5) stellen  $W^\varphi$  en  $W^\theta$  de verankeringsenergieën voor van de twist en de tilt. In de praktijk is de twistverankering  $W^\varphi$  zwakker dan de tiltverankering  $W^\theta$ . Voor gerubde polyimides vindt men  $W^\varphi = 10^{-4} \text{ J/m}^2$  en  $W^\theta = 10^{-3} \text{ J/m}^2$  [16].

### 1.2.4 De elektrische energiedichtheid

De elektrische energiedichtheid van een polariseerbaar medium is gerelateerd aan de diëlektrische anisotropie. In een vloeibaar kristal is die anisotropie het gevolg van de dipoolmomenten van de moleculen.

Om anisotropie te kunnen behandelen, vervangen we de diëlektrische constante  $\varepsilon$  door de diëlektrische tensor  $\overline{\overline{\varepsilon}}$ . Deze tensor is gedefinieerd in een orthonormaal assenstelsel met de Z-as volgens de director (1.7).

$$\overline{\overline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_\perp & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_\perp & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_\parallel \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

In deze tensorvoorstelling is  $\varepsilon_\parallel$  de diëlektrische constante volgens de richting parallel met de director en  $\varepsilon_\perp$  diëlektrische constante

volgens de richting loodrecht op de director. De diëlektrische anisotropie zelf is gedefinieerd als  $\Delta\epsilon = \epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}$ .

Uit thermodynamische overwegingen vinden we de elektrische energiedichtheid  $f_{elek,LCD}$  in een vloeibaar-kristalbeeldscherm (1.8) [17].

$$f_{elek,LCD} = f_{elek} + f_{bron} = \pm \frac{1}{2} \vec{E} \left( \overline{\overline{\epsilon}} \vec{E} \right) \quad (1.8)$$

Het plusteken wordt gebruikt als de lading  $Q_{el}$  op de elektrodes constant blijft, het minteken als de spanning  $V$  over de elektrodes constant blijft. Een externe spanningsbron voert in het laatste geval extra vermogen toe aan het systeem.

Uit de eerste wet van Maxwell volgt dat het elektrische veld  $\vec{E}$  loodrecht op de elektrodes staat. De diëlektrische verplaatsing  $\vec{D}$  berekenen we door de diëlektrische tensor (1.9) gebruiken, om de juiste assenconventie te verkrijgen. Deze diëlektrische verplaatsing  $\vec{D}$  staat, wegens de anisotropie, niet loodrecht op de elektrodes en heeft bijgevolg een component evenwijdig met de elektrodes. De component van het D-veld die loodrecht op de elektrode staat is gelijk aan de ladingsdichtheid op de elektrode.

Transformeren we nog de diëlektrische tensor van het assenstelsel vast aan de director, naar het assenstelsel vast aan het beeldscherm (de  $z$ -as staat loodrecht op de glasplaten) (1.9).

$$\overline{\overline{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \varphi \cos^2 \theta & \frac{1}{2} \Delta\epsilon \sin 2\varphi \cos^2 \theta & \frac{1}{2} \Delta\epsilon \cos \varphi \sin 2\theta \\ \frac{1}{2} \Delta\epsilon \sin 2\varphi \cos^2 \theta & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \varphi \cos^2 \theta & \frac{1}{2} \Delta\epsilon \sin \varphi \sin 2\theta \\ \frac{1}{2} \Delta\epsilon \cos \varphi \sin 2\theta & \frac{1}{2} \Delta\epsilon \sin \varphi \sin 2\theta & \epsilon_{//} \sin^2 \theta + \epsilon_{\perp} \cos^2 \theta \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Dan kunnen we (1.8) schrijven in functie  $D_z$  en de tilthoek  $\theta$ :

$$f_{elek}(z) = \frac{1}{2} E_z D_z \quad (1.10)$$

$$f_{elek}(z) = \frac{D_z^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_{zz}} = \frac{D_z^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_{\perp} \left( 1 + \frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon_{\perp}} \sin^2 \theta \right)} \quad (1.11)$$

Hieruit volgt dat bij een positieve anisotropie ( $\Delta\varepsilon > 0$ ) de director zich zal aligneren volgens het elektrische veld ( $\theta=\pi/2$ ) om de energiedichtheid te minimaliseren. Bij negatieve anisotropie ( $\Delta\varepsilon < 0$ ) zal de director zich aligneren loodrecht op het elektrische veld ( $\theta=0$ ).

### 1.2.5 De minimale energie

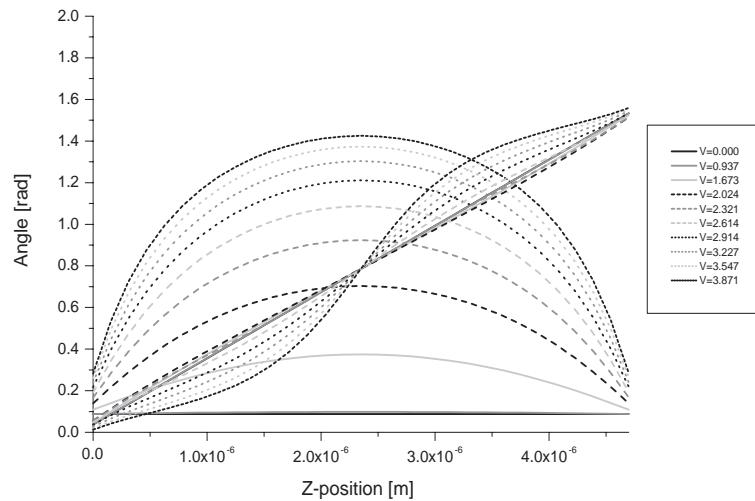
De evenwichtoplossing (statisch) voor de director-oriëntatie volgt uit de minimalisatie van de totale energie (1.12).

$$F_{tot} = \int_0^{d_{LC}} (f_{elast}(z) + f_{elek}(z)) dz + F_S \quad (1.12)$$

Tabel 1.1 geeft een overzicht van de belangrijkste parameters voor een veelgebruikt vloeibaar-kristalmengsel ZLI 4792 (Merck). Figuur 1.6 toont de evenwichtoplossing voor verschillende spanningen, aangelegd aan een getwist-nematisch beeldscherm van  $4.7 \mu\text{m}$  dikte, gevuld met ZLI 4792, waarbij perfecte verankering van de moleculen ondersteld werd aan de aligneringslaag. De initiële tilt aan beide wanden is  $5^\circ$ . De oppervlakte-energie  $F_S$  is in dit geval nul.

$K_1$	$20^\circ \text{ C}$	$13.2 \text{ pN}$
$K_2$	$20^\circ \text{ C}$	$6.5 \text{ pN}$
$K_3$	$20^\circ \text{ C}$	$18.3 \text{ pN}$
$\Delta\epsilon$	$1 \text{ kHz}, 20^\circ \text{ C}$	$5.2$
$\epsilon_{//}$	$1 \text{ kHz}, 20^\circ \text{ C}$	$8.3$
$\Delta n$	$589 \text{ nm}, 20^\circ \text{ C}$	$0.0969$
$n_{//}$	$589 \text{ nm}, 20^\circ \text{ C}$	$1.5763$
Rot. Visc. $\gamma$	$20^\circ \text{ C}$	$123.2 \text{ mPa.s}$
viscositeit	$20^\circ \text{ C}$	$15 \text{ mm}^2/\text{s}$
$T_{\text{smeect} \rightarrow \text{nemat}}$		$< -40^\circ \text{ C}$
$T_{\text{nemat} \rightarrow \text{isotroop}}$		$92^\circ \text{ C}$

Tabel 1-1: Overzicht van de gegevens voor het vloeibaar-kristalmengsel ZLI 4792. Links de parameter, midden de specifieke voorwaarden, rechts de waarde.



Figuur 1.6: Evenwichtsdirector-oriëntaties , opgesplitst in twist en tilt, voor verschillende spanningen. Initieel liggen de moleculen evenwijdig met de glasplaten en is de tilthoek gelijk aan een kleine beginwaarde van  $2^\circ$ . Bij het aanleggen van de spanning richten de moleculen zich op, de tilt hoek bereikt in het midden de maximale waarde van  $\mu/2$ . De wenteltrapstructuur (twistverdeling) wordt slechts een weinig verstoord bij het aanleggen van de spanning.

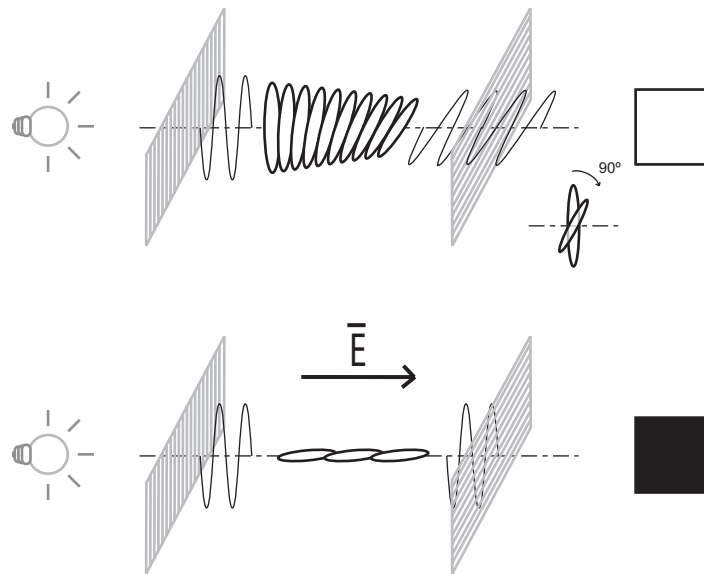
Het is duidelijk te zien dat bij het aanleggen van een voldoende hoge spanning, de moleculen in het midden van de structuur zich verticaal oprichten volgens het elektrische veld (tilt), terwijl de twist lichtjes verstoord wordt. Deze toestand wordt de *geschakelde toestand* genoemd, de director schakelt onder invloed van een elektrisch veld.

### 1.3 De optische werking

In deze paragraaf geef ik een beknopte uitleg over de optische werking van een vloeibaar-kristalbeeldscherm. Een vollediger uitleg kan gevonden worden in de doctoraten van Frank Cuypers [17], Peter Vetter [18] en Koenraad Vermeirsch [19].

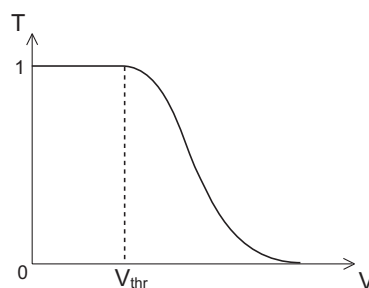
In figuur 1.4, de opbouw van een getwist-nematisch vloeibaar-kristalbeeldscherm (TN-LCD), ontbreken twee belangrijke onderdelen om de optische werking mogelijk te maken: de polarisator en de analysator. Licht van een bron wordt eerst door de polarisator gefilterd tot lineair gepolariseerd licht overblijft. Dit lineair gepolariseerde licht propageert dan door de structuur van het vloeibaar-kristalbeeldscherm. De analysator analyseert dan de gewijzigde polarisatietoestand van het uitredende licht. Figuur 1.7 toont de opbouw voor de optische werking van een TN-LCD. Bij een TN-LCD wordt de doorlaatrichting van de polarisator evenwijdig genomen met de rubrichting van de eerste aligneringslaag. Analoog ligt de doorlaatrichting van de analysator evenwijdig met de tweede aligneringslaag (bijv.  $90^\circ$  gedraaid t.o.v. de polarisatierichting van de polarisator, als de aligneringslagen over  $90^\circ$  gedraaid zijn).

De optische werking gaat als volgt. In de ongeschakelde toestand komt het lineair gepolariseerd licht binnen volgens de lange as van de moleculen. Tijdens de propagatie volgt de polarisatierichting van het licht de wenteltrapstructuur (dit is een benadering die alleen opgaat als de twist voldoende klein is). Staat de doorlaatrichting van de analysator nu loodrecht op de doorlaatrichting van de polarisator, gaat het licht ongemoeid door de analysator. Het resultaat is een heldere toestand. Brengen we vervolgens een voldoende hoge spanning aan over de vloeibare-kristallaag, is  $\Delta\epsilon > 0$ , dan richten de moleculen zich volgens het elektrische veld. De wenteltrapstructuur wordt verbroken, waardoor de polarisatierichting van het licht niet meer gedraaid wordt. Het licht valt dus op de analysator met een polarisatierichting loodrecht op de doorlaatrichting van de analysator, het licht wordt geabsorbeerd. Een donkere toestand is het resultaat.



**Figuur 1.7: Illustratie bij de optische werking van een getwist-nematisch vloeibaar-kristalbeeldscherm.**

Een vloeibaar-kristalbeeldscherm is wat men noemt een lichtkleptechnologie. Het moduleert de intensiteit van een achterliggende lichtbron. De werkwijze voor wit (volledige transmissie) en zwart (volledige absorptie) werd hierboven uitgelegd. Intermediaire grijswaarden zijn echter ook mogelijk door een tussenliggende spanning aan te leggen. Een belangrijke karakteristiek van een vloeibaar-kristalbeeldscherm is dan ook de *transmissie-karakteristiek*, die de transmissie weergeeft in functie van de aangebrachte spanning over de elektrodes. Figuur 1.8 toont schematische deze karakteristiek. Er is steeds een drempelspanning, waaronder de transmissie niet verandert. Spanningen boven de drempelspanning verlagen de transmissie.



**Figuur 1.8: Schematische transmissie-karakteristiek van een vloeibaar-kristalbeeldscherm.**

De bovenstaande beschrijving correspondeert met *de positieve-contrast mode* of *Normally White*. Leggen we de doorlaatrichting van de analysator parallel met de polarisator, dan krijgen we de complementaire mode, *negatieve-contrast mode* of *Normally Black*.

Lichtpropagatie door de vloeibaar-kristalstructuur steunt op dubbelbreking. De intredende lichtgolf wordt opgesplitst in de gewone en de buitengewone golf, resp. loodrecht op en parallel met de lange as van de director. Is  $\Delta n > 0$  dan ziet de gewone golf een lagere brekingsindex, waardoor zijn propagatiesnelheid hoger is dan die van de buitengewone golf. In een uniform uni-axiaal

medium, zoals bijv. een nematische vloeibare-kristalstructuur zonder wenteltrap, verandert de polarisatietoestand van het intredende licht niet indien de polarisator perfect opgelijnd is met de oppervlakedirector. Het intredende licht gaat over in de buitengewone golf en ziet gedurende zijn propagatie geen andere brekingsindex. Het verhaal gaat niet meer op als het licht niet meer invalt volgens de as van de moleculen. De intredende golf splitst zich dan in een gewone en buitengewone golf. Omdat beide golven met een verschillende snelheid propageren door het vloeibaar kristal, verandert de polarisatietoestand van het licht voortdurend: het is bijna steeds elliptisch gepolariseerd.

Bij een getwist-nematische cel is de optische werking een combinatie van beiden. Hoewel het licht invalt volgens de lange as van de moleculen, veroorzaakt de wenteltrapstructuur de splitsing in de gewone en buitengewone golf. Over het algemeen is de polarisatietoestand van het uitdredende licht elliptisch gepolariseerd. Indien we de dikte van de vloeibaar-kristallaag  $d_{lc}$  aanpassen aan de optische anisotropie  $\Delta n$  van het mengsel, wordt voor één golflengte de polarisatietoestand van het licht lineair en gericht volgens de preferentiële richting van de analysator. Dunne vloeibare-kristallagen moet voldaan zijn aan de voorwaarde van Gooch en Tarry (1.13) [20]:

$$\frac{d_{lc} \Delta n}{\lambda} = \sqrt{m^2 - \frac{1}{4}} \quad (1.13)$$

$m$  is een geheel getal, voor  $m = 1$  spreekt men van een eerste minimum beeldscherm. De hoogste optische performantie wordt bereikt door het product  $d_{lc} \Delta n$  af te stemmen op de golflengte van 550 nm.



Om de optische werking in detail te bestuderen moeten de Maxwell-vergelijkingen opgelost worden [17][21]. In de praktijk worden twee numerieke methodes gebruikt: de Jones-methode en de Berreman-methode.

De 2x2 matrix-methode van Jones veronderstelt dat de dubbelbreking klein is. Het houdt ook enkel rekening met de twee transversale componenten van het elektrische veld. Interne reflecties worden verwaarloosd [22, 23].

De 4x4 methode van Berreman bevat de twee transversale componenten van het elektrische en het magnetische veld. Deze methode houdt rekening met interne reflecties [24].

Eén van de belangrijkste definities is de *Fréedericksz-drempelspanning*  $V_{thr}$ . Veronderstellen we de pretilt nul en de verankering oneindig sterk, dan bestaat er een spanning waaronder het elektrisch koppel niet sterk genoeg is om het directorprofiel te vervormen. De drempelspanning waarbij het directorprofiel begint te wijzigen noemen we de Fréedericksz-drempelspanning (1.14).

$$V_{thr} = \sqrt{\frac{K_1\pi^2 + (K_3 - K_2)\Phi^2 + 2K_2q_0d_{lc}\Phi}{\epsilon_0\Delta\epsilon}} \quad (1.14)$$

Hierin is  $\Phi$  de totale twist van de directors doorheen de vloeibaar-kristallaag. De optische drempelspanning ligt hoger dan de theoretische Fréedericksz-drempelspanning voor schakeling, omdat het directorveld een zekere verstoring moet opgelopen hebben alvorens dit optisch merkbaar wordt. De optische drempelspanning verlaagt naarmate de verankering zwakker wordt en de pretilt groter.

## 1.4 Elektronische aansturing

De aansturing van getwist-nematische vloeibare-kristalbeeldschermen verschilt naar gelang de toepassing. Wanneer het beeldscherm slechts uit enkele beeldpunten bestaat, is het gemakkelijker rechtstreeks spanningen aan te brengen aan elk beeldpunt. Typische voorbeelden zijn uurwerken en eenvoudige rekenmachines. Ook in testcellen wordt elk beeldpunt apart aangestuurd.

In gelijk welke manier van aansturing moet men er steeds voor zorgen dat er geen DC-component aanwezig is in de aangelegde spanningen. Een DC-component in het stuursignaal kan, op langere termijn, voor elektrochemische ontbinding van de moleculen zorgen. Daarom maakt men gebruik van bipolaire aansturingspulsen (vb. een blokgolf). Dit tast de elektro-optische eigenschappen van het TN-LCD niet aan, wegens de uni-axialiteit van de director (de richtingen  $\vec{n}$  en  $-\vec{n}$  zijn niet te onderscheiden).

Aan de frequentie worden in principe geen voorwaarden opgelegd. In de praktijk gebruikt men echter wisselspanningen van voldoende hoge frequentie zodat de vloeibaar-kristalmoleculen niet meer kunnen volgen. De moleculen reageren dan op de rms-waarde van het signaal. Dit gebeurt al vanaf enkele tientallen Hertz.

Voor beeldschermen met een grotere informatie-inhoud is één connectie per beeldpunt niet meer mogelijk en maakt men gebruik van twee gekende technieken: Passieve en Actieve Matrix.

### 1.4.1 Passieve matrix

Bij passieve-matrixaansturing wordt het beeldscherm opgebouwd uit  $n$  rijen en  $m$  kolommen. De beeldpunten zijn de  $m \times n$  overlappings tussen de rijen en de kolommen (figuur 1.9). Het aantal interconnecties neemt gevoelig af in vergelijking met de directe aansturing. In plaats van  $m \times n$  rechtstreekse verbindingen zijn er in de matrixaansturing slechts  $m+n$  verbindingen nodig. Om de matrix van beeldpunten aan te sturen, is een multiplexeringstechniek noodzakelijk.

De aansturing verloopt als volgt: elke rij wordt één na één geadresseerd. Ondertussen verschijnen parallel op de kolomelektrodes de datasignalen die beslissen over een “AAN” of “UIT” toestand van de respectievelijke beeldpunten. De spanning die dan over elk beeldpunt staat, is het verschil tussen de rijspanning (de adressering) en de kolomspanning (de informatie). Bij multiplexering is er echter een fundamenteel probleem. Vermits elk beeldpunt gevormd wordt door de overlap van een rij- en een kolomelektrode, voelt elk beeldpunt uit die kolom, gedurende de niet geadresseerde lijntijd, de dataspanning die bestemd is voor het beeldpunt van de geadresseerde rij. Deze *overspraak* (Eng. cross talk) is nadelig voor de optische werking van het beeldscherm, omdat de moleculen reageren op het rms-spanning van het signaal. Om nog een onderscheid te kunnen maken tussen de “AAN” en “UIT” toestand, moet de bijdrage van de informatiedragende spanning t.o.v. de overspraakspanning worden verhoogd. Dit kan door de amplitude van de rijspanning te verhogen. Alt en Pleshko bewezen dat er een optimale verhouding bestaat tussen de rij- en kolomspanning [25]. Stellen we dat de rijspanning  $R$  bedraagt en kolomspanning  $K$  voor de “UIT” toestand en  $-K$  voor “AAN”. Voor een matrix opgebouwd uit  $m$  rijen en  $n$  kolommen wordt de rms-spanning voor de “AAN” toestand gegeven door (1.15) en voor de “UIT” toestand door (1.16).

$$V_{AAN} = \sqrt{\frac{(R + K)^2 + (m - 1)K^2}{m}} \quad (1.15)$$

$$V_{UIT} = \sqrt{\frac{(R - K)^2 + (m - 1)K^2}{m}} \quad (1.16)$$

De optimale verhouding wordt verkregen voor  $\frac{R}{K} = \sqrt{m}$  en bedraagt:

$$\frac{V_{AAN}}{V_{UIT}} = \sqrt{\frac{\sqrt{m} + 1}{\sqrt{m} - 1}} \quad (1.17)$$

Dit impliceert echter dat naarmate het aantal lijnen stijgt, de lijntijd daalt en de hoeveelheid ‘nuttige’ informatie t.o.v. de overspraaksignalen ook vermindert: met andere woorden de verhouding (1.17) wordt kleiner. Dit is de belangrijkste beperking van deze aansturingstechniek. Desalniettemin kan men deze techniek blijven gebruiken als men erin slaagt een steilere optische karakteristiek te realiseren. Dit kan bij de Super Twisted Nematic (STN), waarin een totale twist tussen  $180^\circ$  en  $270^\circ$  gebruikt wordt. Het nadeel is echter de sterke golflengte afhankelijkheid [26].

Bij hoge-resolutiebeeldschermen zal overgeschakeld worden op actieve-matrixsturing.

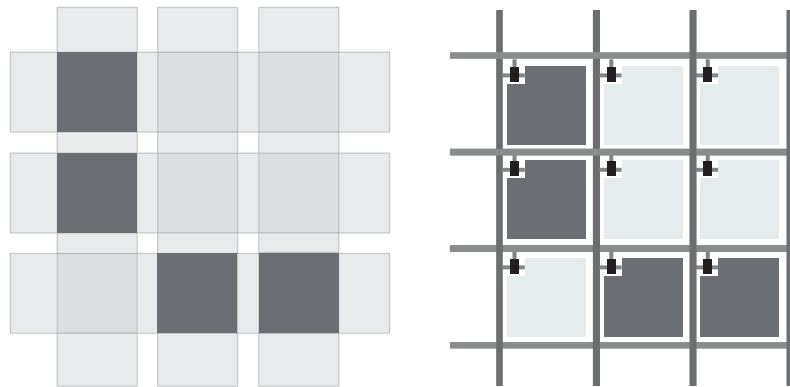
#### 1.4.2 Actieve matrix

Bij actieve-matrixaansturing combineren we de voordelen van multiplexering (het gering aantal connecties) met de voordelen van directe aansturing (grijsniveau's, ontbreken van overspraak en grotere kijkhoek).

Het beeldscherm wordt nog steeds onderverdeeld in rijen en kolommen, maar per beeldpunt wordt een niet-lineair schakelelement geïntegreerd. In de praktijk kunnen verschillende technologieën gebruikt worden: tweepinnige schakelaars zoals PIN-diodes en MIM-diodes of driepinnige dunne-filmtransistoren (Eng. Thin Film Transistor, TFT). Het grootste deel van de actieve-matrix vloeibare-kristalbeeldschermen (AM-LCD) worden gerealiseerd met tft's als schakelementen. Men verbindt de gate van de transistoren met de rijelektrode, de source met de kolomelektrode en de drain met de elektrode van het beeldpunt. Alle elektrodes, schakelaars en cross-over isolatoren worden op één glasplaat aangebracht (figuur 1.9). Op de andere glasplaat bevindt zich een uniforme tegenelektrode.

De rijen worden opnieuw sequentieel geadresseerd. Gedurende de lijntijd worden alle transistoren die via hun gate met dezelfde rijelektrode verbonden zijn, in geleiding gebracht. De informatie die dan via de kolomen beschikbaar is, verschijnt op de beeldpunten door lading op de elektrode te plaatsen i.p.v. spanning. Vermits de niet geadresseerde transistoren afgeknepen staan, is het probleem van overspraak van de baan. Aan het einde van deze lijntijd wordt de volgende rij geadresseerd en geleiden de transistoren van deze lijn niet meer. De lading blijft staan op de beeldelektrode.

De keerzijde van deze technologie is het vervaardigen van een defectvrije actieve-matrix. In een “full-color” XGA AM-LCD zijn dus 2.359.296 transistoren geïntegreerd die allemaal naar behoren moeten werken. De *yield*, het aantal perfect werkende beeldschermen t.o.v. het aantal geproduceerde, is de hoofdbekommernis van de producenten. Het verklaart ook de kostprijs van één AM-LCD-beeldscherm.



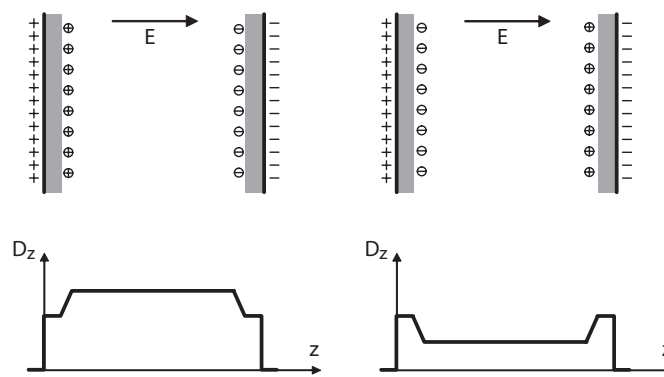
**Figuur 1.9: Passieve-Matrix (links) en Actieve-Matrix (rechts) aansturing van een vloeibaar-kristalbeeldscherm.**

## 1.5 Ionentransport en het effect op Vloeibare Kristallen

Gaan we even dieper in op de actieve-matrixaansturing. Bij deze aansturing wordt een lading aangebracht op het beeldpunt om de spanning constant te houden over dit beeldpunt. Dit blijkt niet het geval te zijn. Ten eerste treedt er een beperkte lekstroom op van ladingen langs het schakelelement. Een tweede reden is geleiding in het vloeibare kristal zelf. Een vloeibare-kristalmengsel bevat een kleine concentratie (ongewenste) geladen deeltjes. Deze geladen onzuiverheden (ionen) bewegen onder invloed van het externe elektrische veld en kunnen aldus het veld verstoren.

Bekijken we het verloop tussen twee lijntijden van een beeldpunt in detail. De beginsituatie is het einde van de vorige lijntijd, m.a.w. de ionaire onzuiverheden zijn gescheiden en zijn tegen de aligneringslagen gedrukt, waaronder de elektrode ligt met een

teggestelde polariteit (de negatieve elektrode trekt de positieve ladingen aan en vice-versa). Bij adressering van de lijn, gaat de transistor in geleiding en zorgt de actieve matrix ervoor dat de spanning over de cel initieel een gegeven waarde  $V$  krijgt over de beeldpuntelektroden. De lading  $Q_{el}$  op de elektrode is op dat ogenblik niet precies gelijk aan  $C_{lcd}V$  omdat er ook een lading op de elektrodes zit die veroorzaakt wordt door de inwendige ladingen. Aan het eind van die lijntijd stopt de geleiding van de transistor. De wet van Gauss leert ons dat de diëlektrische verplaatsing een sprong maakt bij een ladingsopstapeling. Deze situatie is te zien links op figuur 1.10.



**Figuur 1.10: Verandering van de diëlektrische verplaatsing onder invloed van geladen deeltjes in een vloeibaar-kristalbeeldscherm: links bij het begin van de spanningspuls; rechts bij het einde van de spanningspuls als de ionen verplaatst zijn.**

Na het afknippen van de transistor blijft  $Q_{el}$  behouden, maar gaat  $V$  wel dalen door de beweging van de inwendige ladingen ( $Q_{el}$  kan ook dalen door lek in de transistoren). In de tijd tot de volgende lijnadressering bewegen de geladen deeltjes volgens het elektrische veld naar de andere zijde van het beeldpunt. Dit leidt tot een verlaging van de diëlektrische verplaatsing en dus tot een verlaging van het elektrische veld in het vloeibaar kristal. Daardoor verandert

de optische transmissie. De lading op de elektrodes blijft behouden zolang de transistor geen stroom voert en daardoor blijft het D-veld in de aligeringslagen ook behouden. Keert men het teken van de lading op de elektrodes om, dan stijgt de diëlektrische verplaatsing, wat opnieuw leidt tot een transmissieverandering. Dit verschijnsel heet in de literatuur *flicker*.

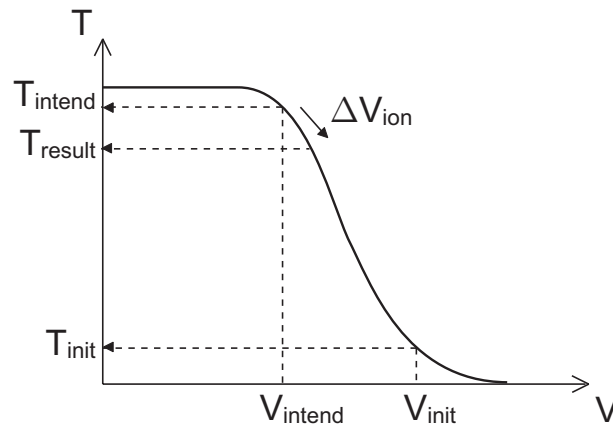
De effectieve spanning  $V_{rms}$  over het LCD blijkt dus lager te zijn dan de aangelegde spanning  $V$  gedurende de korte tijd dat het schakelelement open is. Hun verhouding heet de *Voltage Holding Ratio* (VHR) (1.18).

$$VHR = \frac{V_{rms}}{V} \cdot 100\% \quad (1.18)$$

In een passieve matrix loopt er lekstroom lang na het opladen van de beeldpuntcapaciteit. De verandering van de lading op de elektrodes wordt dan geïnduceerd door bewegende ionen in het vloeibaar kristal. Deze ionen verlagen het elektrische veld in de vloeibare-kristallaag, de spanningsbron moet dan ladingen aanvoeren om de spanning constant te houden. Dit fenomeen is al een geruime tijd gekend [27 - 30].

Een tweede verschijnsel is *Image Sticking* of *Image Retention*. Wanneer een beeld gedurende een langere tijd op een beeldscherm vertoond wordt en dan terug verwijderd wordt, blijft er een restbeeld achter. Wordt initieel een beeldpunt op een hoge spanning aangestuurd en daarna teruggeschakeld naar een lagere spanning, blijkt de waargenomen transmissie te verschillen van de gewenste (figuur 1.11). De oorzaak van dit fenomeen ligt bij asymmetrische aansturing, waardoor het AC-aansturingssignaal niet perfect symmetrisch is, maar een kleine DC-component bezit. Hierdoor kan een lange-termijn DC-spanning over dat beeldpunt staan [31].





**Figuur 1.11: Illustratie van Image Sticking op de transmissie karakteristiek.**

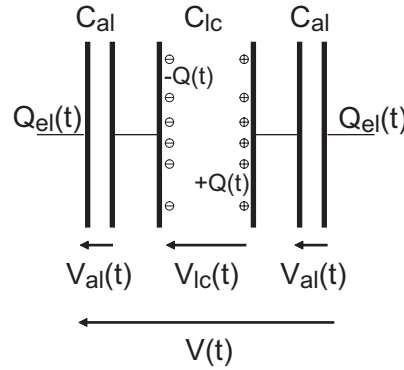
## 1.6 Eéndimensionale benadering van ionentransport

Het ionentransport werd in één dimensie uitgebreid onderzocht door mijn voorgangers Chris Colpaert [30] en Herbert De Vleeschouwer [31]. Deze paragraaf is een inleiding tot ionentransport en vormt de basis voor mijn onderzoek. Voor een gedetailleerde uitwerking van de hiernavolgende theorie verwijs ik naar deze twee doctoraten.

### 1.6.1 Ruimteladingslimiet

De ruimteladingslimiet (Eng. Space Charge Limit (SCL)) is een maatstaf, waartegen een bepaalde ionenconcentratie kan afgewogen worden. Het is de theoretische ionenconcentratie (bij een bepaalde aansturing) die nodig is om bij volledige ladingsscheiding het externe elektrische veld op nul te brengen. Deze maatstaf geeft m.a.w. aan of de aanwezige ionenconcentratie belangrijk genoeg is

om het elektrische veld te verstoren en dus ook de transmissie te wijzigen.



**Figuur 1.12: Veralgemeening vloeibaar-kristalbeeldpunt, voorgesteld door capaciteiten.**  
(lading links is  $-Q_{el}$ )

We vertrekken van een veralgemeend vloeibare-kristalbeeldpunt en veronderstellen geen lek door de aligneringslagen. Bij lekkende lagen heeft de definitie van de ruimteladingslimiet geen zin. Figuur 1.12 toont de schematische opbouw. Een spanning  $V(t)$  op het tijdstip  $t$  brengt een lading  $Q_{el}(t)$  op de elektrodes. De spanningsval over één aligneringslaag is  $V_{al}(t)$  en over de vloeibaar-kristallaag  $V_{lc}(t)$ .

We schrijven:

$$V_{lc}(t) + 2V_{al}(t) = V(t) \quad (1.19)$$

$$\frac{Q_{el}(t) - Q(t)}{C_{lc}} + 2 \frac{Q_{el}(t)}{C_{al}} = V(t) \quad (1.20)$$

In (1.20) stelt  $Q(t)$  het aantal gescheiden ionen voor. De beginsituatie van de ionen is een homogene verdeling,  $Q(t)$  is initieel gelijk aan nul ( $Q(0) = 0$ ). Bij actieve-matrixaansturing is de lading  $Q_{el}$  constant. Bij  $t=0$  vinden we dus (1.21).

$$Q_{el} = \frac{C_{lc}C_{al}V(0)}{C_{al} + 2C_{lc}} \quad (1.21)$$

De ruimteladingslimiet wordt bepaald door  $V_{lc} = 0$ , de spanning over de vloeibare-kristallaag moet nul worden.

$$V_{lc}(t) = \frac{Q_{el} - Q(t)}{C_{lc}} = 0 \quad (1.22)$$

Hieraan kan enkel voldaan zijn als  $Q_{el}$  gelijk is aan  $Q(t)$ . Hierdoor vinden we gemakkelijk de ruimteladingslimiet  $Q_{SCL}$  voor actieve matrix.

$$Q_{SCL,AM} = \frac{C_{lc}C_{al}V(0)}{C_{al} + 2C_{lc}} = \alpha \cdot C_{lc}V(0) \quad (1.23)$$

De factor  $\alpha$  is ongeveer één en kleiner dan één, omdat  $C_{lc} \ll C_{al}$  [32].

Bij passieve-matrix en directe aansturing valt het veld pas op nul als de spanning volledig over de aligneringslagen ligt. Met andere woorden als:

$$2 \frac{Q_{el}(t)}{C_{al}} = V(t) \quad (1.24)$$

En opnieuw als  $Q_{el}(t)$  gelijk is aan  $Q(t)$ . Waardoor de ruimteladingslimiet voor passieve matrix gegeven is door (1.25).

$$Q_{SCL,PM} = C_{al}V / 2 \quad (1.25)$$

De ruimteladingslimiet bij passieve-matrixaansturing is veel groter dan voor actieve-matrix-aansturing. De spanningsbron kan immers ladingen aanvoeren om de veldverlaging als gevolg van het ionentransport teniet te doen. Dit wil ook zeggen dat transmissieveranderingen door ionen (image sticking) bij actieve matrix aansturing een veel grotere probleem vormen dan bij passieve matrix of directe aansturing.

In de praktijk gebeurt onderzoek naar ionentransport voornamelijk met directe aansturing, omdat we hier de stroom kunnen meten die naar de elektrodes vloeit. Deze stroommetingen bevatten belangrijk informatie over de eigenschappen van de ionaire onzuiverheden in het vloeibaar-kristalmateriaal.

In dit proefschrift zal ik me dan ook beperken tot directe aansturing van nematische vloeibare-kristalbeeldpunten.

### 1.6.2 Bewegingsvergelijking van het ionentransport

De ééndimensionale benadering voor het opstellen van de transportvergelijkingen is fysisch verantwoord. Het oppervlak van een typisch beeldpunt is qua dimensies veel groter ( $300 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ ) dan de dikte van de vloeibare-kristallaag ( $d_{lc} \sim 5 \mu\text{m}$ ).

We vertrekken bij de uitdrukking voor de lokale stroomdichtheid  $\vec{J}_i$  voor een ionsoort  $i$ . Die is opgebouwd uit een driftterm en een diffusie-term.

$$\vec{J}_i^\pm = \vec{J}_i^{\pm, \text{drift}} + \vec{J}_i^{\pm, \text{diff}} = e\bar{\mu}_i n_i^\pm \vec{E} \mp e\bar{D}_i \nabla n_i^\pm \quad (1.26)$$

Hierin hebben we de volgende parameters voor ionsoort  $i$ :  $n_i$  de lokale concentratie,  $\bar{\mu}_i$  de mobiliteitstensor,  $\vec{E}$  elektrische veldvector,  $\bar{D}_i$  de diffusietensor en  $e$  de elementaire lading ( $e = 1.6022 \times 10^{-19}$  C). In de tweede term van (1.26) gebruiken we het minteken voor de positieve ionen, het plusteken voor de negatieve ionen.

In de 1D situatie heeft het elektrische veld enkel een component in de  $z$ -richting, loodrecht op de glasplaten. De mobiliteitstensor is driedimensionaal en is volkomen analoog aan de diëlektriciteitstensor (1.9). De director is uni-axiaal, zodat  $\mu_{//}$  de mobiliteit langs de lange as van de director is en  $\mu_{\perp}$  de mobiliteit er loodrecht op ( $\Delta\mu = \mu_{//} - \mu_{\perp}$ ).

$$\bar{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{\perp} + \Delta\mu \cos^2 \varphi \cos^2 \theta & \frac{1}{2} \Delta\mu \sin 2\varphi \cos^2 \theta & \frac{1}{2} \Delta\mu \cos \varphi \sin 2\theta \\ \frac{1}{2} \Delta\mu \sin 2\varphi \cos^2 \theta & \mu_{\perp} + \Delta\mu \sin^2 \varphi \cos^2 \theta & \frac{1}{2} \Delta\mu \sin \varphi \sin 2\theta \\ \frac{1}{2} \Delta\mu \cos \varphi \sin 2\theta & \frac{1}{2} \Delta\mu \sin \varphi \sin 2\theta & \mu_{//} \sin^2 \theta + \mu_{\perp} \cos^2 \theta \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

De mobiliteits- en de diffusietensoren zijn trouwens verbonden met elkaar via de Einstein-Diffusievergelijking (1.28).

$$\bar{D} = \bar{\mu} \cdot \frac{kT}{Ze} \quad (1.28)$$

Met  $Z$  de valentie van de ionsoort,  $k$  de Boltzmannconstante en  $T$  de absolute temperatuur.

In 1D herleidt vergelijking (1.26) zich dan tot (1.29):

$$J_i^{\pm} = e\mu_i n_i^{\pm} E_z \mp eD_i \frac{\partial n_i^{\pm}}{\partial z} \quad (1.29)$$

Waarin  $\mu_i$  en  $D_i$  de  $zz$ -componenten zijn van de tensoren, omdat we enkel de  $z$ -component van de snelheid  $v_z$  gebruiken en omdat alleen de  $z$ -componenten van het  $E$ -veld en van de gradiënt in de concentratie verschillend van nul zijn.

$$v_z = \mu_{zz} E_z \quad (1.30)$$

$$\mu_i = \mu_{zz} = \mu_{//} \sin^2 \theta + \mu_{\perp} \cos^2 \theta \quad (1.31)$$

Combineren we (1.29) met de continuïteitsvergelijking (1.33).

$$\nabla \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (1.32)$$

of

$$\frac{\partial J_i^{\pm}}{\partial z} = \mp e \frac{\partial n_i^{\pm}}{\partial t} \quad (1.33)$$

Dan vinden we de bewegingsvergelijking voor geladen deeltjes  $i$  (we nemen in de vergelijking telkens het bovenste teken voor positieve ladingen en het onderste voor de negatieve).

$$\frac{\partial n_i^{\pm}}{\partial t} = \mp \mu_i \frac{\partial}{\partial z} (n_i^{\pm} E_z) + D_i \frac{\partial^2 n_i^{\pm}}{\partial z^2} \quad (1.34)$$

De oplossing van deze differentiaalvergelijking geeft de evolutie van de deeltjesdistributie  $n_i(z, t)$  doorheen de vloeibaar-kristallaag in functie van de tijd per ionsoort  $i$ .

We dienen nog de randvoorwaarden toe te voegen om tot een unieke oplossing te komen. Omdat we de aligneringslagen beschouwen als perfecte isolatoren zijn deze eenvoudig te vinden:

$$J_i^{\pm}(0, t) = J_i^{\pm}(d_{lc}, t) = 0 \quad (1.35)$$

De ionen kunnen enkel bewegen tussen de randen van de vloeibaar-kristallaag.

De aanwezigheid van geladen deeltjes heeft een invloed op het elektrische veld. Om de algemene situatie uit te rekenen moeten we de differentiaalvergelijking (1.34) combineren met de wet van Gauss (1.36).

$$\nabla \vec{D} = \rho \quad (1.36)$$

Hierdoor krijgen we een stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen. Dit stel is oplosbaar mits het invoeren van extra randvoorwaarde. De randvoorwaarde verschilt naargelang de aansturingstechnologie. Bij directe aansturing houdt men de spanning constant op de elektrodes. Bij actieve matrix wordt de lading op de elektrodes constant gehouden.

### 1.6.3 Limietgevallen Bewegingsvergelijking

Het stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen moet slechts gezamenlijk opgelost worden als de ionenconcentratie voldoende hoog is om het elektrische veld te verstoren. Is dit niet het geval, dan kan de bewegingsvergelijking zelfs analytisch opgelost worden voor twee speciale gevallen.

#### 1.6.3.1 Beweging in de bulk bij een constant veld

Met “bulk” bedoelt men dat deel van de vloeibaar-kristaallaag waar de wanden geen invloed hebben en de concentratie naar nul gaat op grote afstand. De bewegingsvergelijking wordt dan (1.37).

$$\frac{\partial n_i^\pm}{\partial t} = \mp \mu_i E_z \frac{\partial n_i^\pm}{\partial z} + D_i \frac{\partial^2 n_i^\pm}{\partial z^2} \quad (1.37)$$

De analytische oplossing (opmerking: deze oplossing onderstelt een oneindige beginconcentratie in een laag, bij  $z=0$ ) hiervan is de Boltzmannvergelijking (1.38).

$$n_i^\pm(z,t) = \frac{N_i^\pm}{\sqrt{4\pi D_i t}} \cdot e^{-\frac{(z \mp \mu_i E t)^2}{4 D_i t}} \quad (1.38)$$

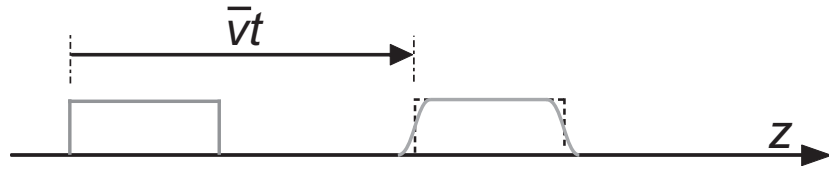
Hierin is  $N_i^\pm$  de beginconcentratie.

Beschouwen we enkel de positieve ionen (bovenste teken), de bespreking voor negatieve ionen is volkomen analoog.

Is de begindistributie een ladingsvlak op  $z = 0$  (een delta-distributie), dan bewegen de ionen volgens de positieve  $z$ -as in de oneindige ruimte, terwijl de distributie een langzaam breder wordende Gaussklok is. De gemiddelde plaats is  $\mu E t$  (drift-term) en de standaard deviatie  $\sqrt{2 D t}$  (diffusie).

Nemen we als begindistributie een homogene rechthoekige verdeling van de ionen in een interval  $[a,b]$  van de vloeibaar-kristallaag (Figuur 1.13 links). Berekenen we voor deze beginsituatie het concentratieverloop door convolutie van de oplossing (1.38), dan blijft de uniforme distributie grotendeels gehandhaafd, enkel aan de randen is er een spreiding zichtbaar (Figuur 1.13 rechts). Indien er enkel drift zou zijn, dan zou de rechthoekige distributie zich verplaatsen in de positieve  $z$ -richting met een snelheid  $v = \mu E$  (Figuur 1.13 rechts streepjeslijn). Diffusie is verantwoordelijk voor de spreiding aan de randen (Figuur 1.13 rechts volle lijn).





**Figuur 1.13: Transport van een uniforme verdeling in de bulk  
(links) initiële situatie, (rechts) na een tijd  $t$ .**

### 1.6.3.2 Evenwichtssituatie bij een constant veld nabij een wand

In het vorige limietgeval waren geen wanden aanwezig, de ionen bewegen zich in de vrije ruimte. Deze tweede limietsituatie bespreekt de invloed van de aanwezigheid van een wand, het is de zogenaamde “Steady State”-oplossing. Het is de evenwichtsooplossing tussen drift naar de wand toe, wat leidt tot een opstapeling van ionen en diffusie weg van de hoge concentratie aan de wand.

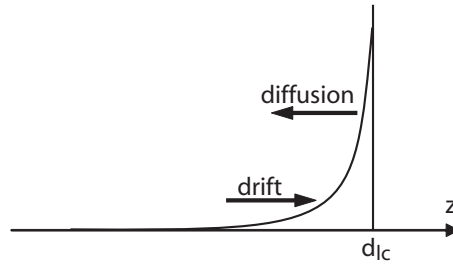
De evenwichtssituatie wordt gevonden als de concentratiedistributie niet meer verandert met de tijd. Dus als (1.39) geldt voor vergelijking (1.37).

$$\frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad (1.39)$$

Lossen we dit op voor positieve ionen die onder invloed van een positief elektrisch veld bewegen naar een wand op  $d_{lc}$ . De oplossing is dan een exponentiële verdeling vanaf die wand tot  $-\infty$ .

$$n_i^+(z, t = \infty) = \frac{N_i^+}{D_i / \mu_i E_z} \cdot e^{\frac{z-d_{lc}}{D_i / \mu_i E_z}} = \frac{ZeE_z}{kT} N_i^+ \cdot e^{\frac{ZeE_z}{kT}(z-d_{lc})} \quad (1.40)$$

Hierin is  $N_i^+$  de beginconcentratie voor de positieve ionsoort  $i$ . De situatie voor de negatieve ionen is volkomen analoog.

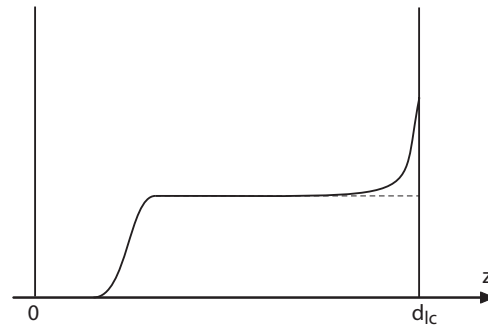


**Figuur 1.14:** De exponentiële evenwichtsverdeling van geladen deeltjes nabij een wand.

### 1.6.3.3 Concentratieverdeling bij een constant veld

In een werkelijke situatie, bij voldoende lage ionconcentratie, treden beide limietsituaties gezamenlijk op. We beschouwen opnieuw enkel positieve ionen met een positief gericht elektrisch veld. De ionen zijn homogeen verdeeld over de vloeibaar-kristallaag in de beginsituatie.

De uniforme –rechthoekige- verdeling zal in de positieve  $z$ -richting bewegen. Ditmaal is er echter een wand aanwezig op  $z = d_{lc}$ . De ionen kunnen niet voorbij deze wand en zullen zich opstapelen vlak voor de wand. Door diffusie zullen de ionen wegbewegen van deze hoge concentratie aan de wand. Figuur 1.15 illustreert deze situatie. We krijgen dus een combinatie van beide limietgevallen, waarin de ionen zich verdelen in een exponentiële distributie aan de wand. Deze exponentiële distributie blijft groeien in oppervlakte tot alle ionen zich in dit gebied bevinden.

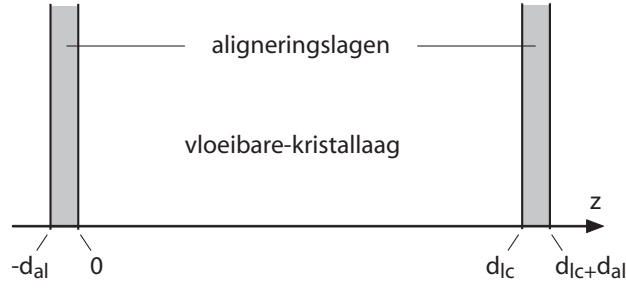


**Figuur 1.15:** Algemene situatie bij een constant veld.

De concentratieverdeling in de vloeibaar-kristallaag is dus een superpositie van de twee distributies, een rechthoekige uniforme verdeling met spreiding die beweegt naar de wand en een exponentiële verdeling aan de wand waar drift en diffusie elkaar compenseren.

#### 1.6.4 Invloed op het Elektrische veld

Om het elektrische veld binnen de vloeibaar-kristallaag bij directe aansturing correct te berekenen, gebruiken we de volgende conventie. De vloeibaar-kristalcel bestaat uit drie lagen, een vloeibaar-kristallaag, dikte  $d_{LC}$ , tussen twee aligneringslagen, elk met een dikte  $d_{AL}$ . Figuur 1.16 toont de opbouw met de afspraken van de posities in de  $z$ -richting. Op de linker elektrode, op  $z = -d_{AL}$ , leggen we de spanning  $V_0$  aan, de rechter elektrode, op  $z = d_{LC} + d_{AL}$ , is geaard.



**Figuur 1.16: Conventie opbouw vloeibaar-kristalcel voor berekening elektrisch veld.**

De diëlektrische permitiviteit van de aligneringslaag is  $\varepsilon_{AL}$ , van de vloeibaar-kristallaag  $\varepsilon_{LC}$ . De oppervlakte van de cel is  $S$  en  $e$  is de elementaire lading. Twee ionsoorten zijn aanwezig in de cel, één positief en één negatief, in totaal is er ladingsneutraliteit (1.41).

$$eSd \int_0^{d_{lc}} [Z^+ n^+(z, t) - Z^- n^-(z, t)] dz = 0 \quad (1.41)$$

Bij directe aansturing is de spanning  $V_0$  over de elektrodes constant.  $Q_0$  is de lading nodig om de effectieve capaciteit  $C_e$  (1.42) van de cel op te laden wanneer een spanning  $V_0$  wordt aangebracht. Nieuwe lading  $Q_{el}(t)$  wordt aangevoerd naar de elektrodes als er een stroom door het circuit vloeit. Deze stroom wordt geïnduceerd door de ionenbeweging in de vloeibaar-kristallaag. De totale lading op de linker elektrode, op een willekeurig tijdstip, is nu  $Q_0 + Q_{el}(t)$ .  $Q_{el}(t)$  is nul bij het begin ( $t = 0$  s). De lading op de rechter elektrode is even groot in absolute waarde, maar heeft een tegengesteld teken.

$$C_e = \frac{C_{lc} C_{al}}{C_{al} + 2C_{lc}} \quad (1.42)$$

Het elektrische veld in de elektrode is steeds gelijk aan nul. De linker aligneringslaag is een capaciteit, het elektrische veld erin is constant (1.43).

$$E(z, t) = \frac{Q_0 + Q_{el}(t)}{\epsilon_0 \epsilon_{AL} S}, \quad -d_{AL} < z < 0 \quad (1.43)$$

Bij de overgang van de linker aligneringslaag naar het vloeibare kristal wordt het elektrische veld net na deze grens gegeven door (1.44).

$$E(0^+, t) = \frac{Q_0 + Q_{el}(t)}{\epsilon_0 \epsilon_{LC} S} \quad (1.44)$$

In het vloeibaar-kristalmateriaal wordt het elektrische veld beïnvloed door de aanwezigheid van de ruimteladingen. De ionen creëren een extra elektrisch veld  $E_i(z, t)$ .

$$E(z, t) = \frac{Q_0 + Q_{el}(t)}{\epsilon_0 \epsilon_{LC} S} + E_i(z, t), \quad 0 < z < d_{LC} \quad (1.45)$$

$$E_i(z, t) = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_{LC}} \int_0^z (Z^+ n^+(z', t) - Z^- n^-(z', t)) dz' \quad (1.46)$$

Met  $n^+(z, t)$  en  $n^-(z, t)$  de concentraties en  $Z^+$  en  $Z^-$  de valentie van de positieve en respectievelijk negatieve ionen.

Bij de overgang van het vloeibaar-kristal naar de rechter aligneringslaag is, wegens de ladingsneutraliteit (1.41), het ionenveld gelijk aan nul,  $E_i(d_{LC}, t) = 0$ . Het totale elektrische veld is dan (1.47), wat gelijk is aan (1.44).

$$E(d_{LC}^-, t) = \frac{Q_0 + Q_{el}(t)}{\epsilon_0 \epsilon_{LC} S} \quad (1.47)$$

In de rechter aligneringslaag is het elektrische veld terug constant en gelijk aan die in de linker aligneringslaag.

$$E(z, t) = \frac{Q_0 + Q_{el}(t)}{\epsilon_0 \epsilon_{AL} S}, \quad d_{LC} < z < d_{LC} + d_{AL} \quad (1.48)$$

Om terug nul te worden op de rechter elektrode.

### 1.6.5 Elektrische Stroom

De elektrische stroom die door het externe circuit vloeit bij directe aansturing kan berekend worden uit (1.49), in de veronderstelling dat er geen lek is.

$$I(t) = \frac{dQ_{el}(t)}{dt} \quad (1.49)$$

$$I(t) = C_e \frac{dV_i(t)}{dt} = -C_e \int_0^d \frac{\partial E_i(t)}{\partial t} dz \quad (1.50)$$

Gebruiken we vergelijkingen (1.46) en (1.42), dan krijgen we:

$$I(t) = \frac{eC_e}{\epsilon_0 \epsilon_{LC}} \int_0^{d_{LC}} \int_0^z \left( Z^- \frac{\partial n^-(z', t)}{\partial t} - Z^+ \frac{\partial n^+(z', t)}{\partial t} \right) dz' dz \quad (1.51)$$

## 1.7 Doelstelling van dit doctoraat

De ééndimensionale benadering van een vloeibaar-kristalbeeldscherm is correct zolang er lateraal geen variatie van de directorprofielen is en de aansturing perfect symmetrisch gebeurt.

Maar de laatste jaren werd het In-Plane-Switching LCD (IPS-LCD) ontwikkeld en geperfectioneerd. De naam zegt het al zelf, de moleculen tilten niet naar de horizontale toestand, maar draaien in een vlak evenwijdig met glasplaten. Dit is een tweedimensionaal vloeibaar-kristalbeeldscherm [33].

Is er in de aansturing een kleine DC component, dan ontstaat er een kleine laterale component in de snelheid. Ionen kunnen dus in een ééndimensionale structuur lateraal bewegen. Dit heeft zijn consequenties voor de goede werking van het beeldscherm [34] [35].

De uitbreiding van de theorie van ééndimensionaal ionentransport naar twee en drie dimensies is de uitdaging die ik in dit proefschrift zal opnemen.

De vergelijkingen die de beweging van een groep gelijksoortige deeltjes, een ensemble genoemd, beschrijven zijn differentiaalvergelijkingen. Het opstellen van een stel differentiaalvergelijkingen voor een probleem is doorgaans vrij simpel. Het oplossen van dit stel vergelijkingen echter meestal niet. Het bestaan van een analytische oplossing voor een stel vergelijkingen kan meestal enkel onder strikte randvoorwaarden. Maar gelukkig kunnen we, met behulp van een computer, de juiste oplossing iteratief benaderen.

Voor ééndimensionale problemen bestaan er talrijke iteratieschema's om zo de oplossing van het stel vergelijkingen te

vinden. Dankzij de steeds sneller wordende rekencapaciteiten van hedendaagse computers, kunnen we tegenwoordig denken aan het oplossen van meerdimensionale problemen. Verschillende iteratieschema's kunnen dan ook gebruikt worden. Soms verdelen we de rekenruimte in gelijkgespatieerde intervallen, de eindige differentie methode (EDM) (Eng. Finite Difference Method; FD method). Soms gebruiken we driehoeken om oppervlakken en tetraëders om volumes te vullen, de eindige elementen methode (EEM) (Eng. Finite Element Method; FE method). Hiermee trachten we het stel differentiaal vergelijking op te lossen.

Deze methodes zijn zeer complex in vergelijking met een 1D oplossing en vereisen zeer veel iteraties om tot een stabiele oplossing te komen.

Er bestaat echter nog een andere mogelijkheid. Hierbij worden geen differentiaalvergelijkingen opgelost, maar toch wordt het gedrag van het ensemble van deeltjes correct benaderd. Namelijk door de bewegingsvergelijkingen van de individuele deeltjes te gebruiken en het statistische gemiddelde te nemen van alle deeltjes. Dit heet een Monte Carlo algoritme. We benaderen zo de continue oplossing. Hierdoor vermijden we het oplossen van ingewikkelde differentiaalvergelijkingen, maar moeten we wel zeer veel deeltjes gebruiken om de ruis binnen de perken te houden.

Ik zal gebruik maken van de Monte Carlo techniek om twee verschillende ionentransportalgoritmen te ontwikkelen.

- Monte Carlo ionentransport in de continue ruimte (2D)
- Monte Carlo ionentransport op een onregelmatige mesh (3D)

Beide technieken worden in dit proefschrift grondig uitgewerkt. De resultaten zullen telkens vergeleken worden met het



ééndimensionale algoritme. Het 1D algoritme werd vroeger reeds getoetst aan experimentele gegevens en zal in dit proefschrift de referentie zijn.

Het opzet van dit proefschrift is dus zuiver theoretisch.



## Hoofdstuk 2

# Monte Carlo algoritme in de continue ruimte (1D)

Dit hoofdstuk bespreekt een methode, gebaseerd op de Monte Carlo techniek, om de bewegingsvergelijking van ionentransport in anisotrope media te berekenen. We benaderen de continue oplossing door “Meta-ionen” te gebruiken die zich gedragen als individuele deeltjes. De concentratieverdeling wordt dan gevonden door het histogram te nemen van alle meta-ionen. Hierdoor omzeilen we het oplossen van de differentiaalvergelijkingen. Om lange berekeningstijden te vermijden maakt deze methode gebruik van zeer grote tijdstappen. Tijdstappen die onafhankelijk zijn van de ruimtelijke spatiëring waarin de rekenruimte onderverdeeld is.

### 2.1 De beweging van geladen deeltjes

Het probleem dat ik in dit proefschrift behandel is de beweging van deeltjes met een lading, met of zonder de aanwezigheid van een

extern elektrisch veld. Voor ik begin aan dit algoritme is het interessant om even terug te kijken naar de fysische microscopische fenomenen die het gedrag van geladen deeltjes bepalen. We beschouwen voor de eenvoud de beweging van de geladen deeltjes (met lading  $Q$ ) in een viskeus isotroop medium.

Thermische diffusie speelt altijd een rol in de beweging van deeltjes in een viskeus medium. De deeltjes ondergaan een *Random-Walk* beweging door te botsen met de moleculen van het medium. De botsingen onderling zijn ongecorreleerd, hun aantal is zeer hoog. Als gevolg hiervan kunnen we het traject van een individueel deeltje niet voorspellen, het is gebaseerd op toeval.

Hoewel we de diffusiebeweging van één deeltje niet exact kunnen bepalen, vertoont een verzameling gelijke deeltjes wel een voorspelbaar gedrag. We kunnen een waarschijnlijkheidsdistributie opstellen. Voor een verzameling deeltjes ver verwijderd van objecten die hun bewegingsvrijheid kunnen belemmeren (vb. een wand) is de distributie, in één dimensie, voor het diffusiefenomeen een normale verdeling.

Leggen we een extern elektrisch veld aan, dan voelen de geladen deeltjes een kracht  $\vec{F} = Q\vec{E}$ . Hierdoor bewegen de deeltjes in het medium met een snelheid  $\vec{v} = \mu\vec{E}$ , met  $\mu$  de mobiliteit van de deeltjessoort in dat medium. Dit noemen we drift. Ditmaal kunnen we wel exact het traject van de individuele deeltjes voorspellen. In een isotroop medium volgen ze namelijk de elektrische veldlijnen indien we diffusie verwaarlozen.

Houden we rekening met diffusie dan kunnen we het gedrag van een verzameling gelijke deeltjes in een elektrisch veld voorspellen. Starten we met een situatie dat alle deeltjes dezelfde beginpositie hebben. De gemiddelde positie van de verzameling deeltjes

beweegt met een snelheid  $\vec{v} = \mu \vec{E}$ , alsof het een individueel deeltje zou zijn. Diffusie zorgt voor de spreiding rond de gemiddelde positie, deze spreiding heeft een normale verdeling.

Tot hiertoe was de bewegingsvrijheid van de geladen deeltjes niet beperkt. De situatie verandert indien er een wand is in de nabijheid van de deeltjes. Een elektrode op een wand is een typische situatie die veelvuldig zal voorkomen bij vloeibare kristalbeeldschermen. De geladen deeltjes bewegen dus volgens de veldlijnen naar de elektrode toe. Daar kunnen ze niet meer verder dus stapelen ze zich op aan die elektrode.

Diffusie tracht de concentratie homogeen te verdelen over de beschikbare ruimte. Een opstapeling nabij de wand zorgt voor een hoge concentratie, zodat diffusie een mechanisme is dat ervoor zal zorgen dat de deeltjes weg van de hoge concentratie aan de wand bewegen. Microscopisch zal dit gepaard gaan met ontelbaar veel botsingen. Botsingen die macroscopisch een beweging weg van de wand met zich meebrengen.

Beide bewegingen samen leiden tot een dynamisch evenwicht. De beweging onder invloed van het elektrische veld naar de wand toe en diffusie beweging van de wand weg leiden tot een waarschijnlijkheidsdistributie nabij de wand. In paragraaf 1.6.3.2 werd afgeleid dat deze distributie een exponentiële verdeling is, met een maximum aan de wand.

Maar ook zonder elektrisch veld beïnvloedt een wand diffusie. Een deeltje botst niet alleen met de moleculen van het medium of zijn eigen soortgenoten, maar botst ook met de wand. Opnieuw is het aantal botsingen onmogelijk exact te beschrijven. Een deeltje tegen de wand kan eigenlijk maar een halve ruimtehoek uit. Hierdoor is de normale waarschijnlijkheidsverdeling verstoord. De helft van de ééndimensionale normale verdeling waar de wand zit wordt

gespiegeld naar de kant van het medium, zo bekomen we twee halve verdelingen op elkaar.

Vatten we deze paragraaf samen, dan merken we drie verschillende regimes op, die telkens een combinatie zijn van diffusie, drift en de aanwezigheid van een wand.

1. Drift en diffusie zonder de aanwezigheid van een wand
2. Drift en diffusie met de aanwezigheid van een wand
3. Diffusie vanaf de wand

## 2.2 Monte Carlo

Deze methode is genoemd naar de stad Monte Carlo in Monaco, bekend van zijn casino, omdat een roulette in feite een simpele random getallengenerator is. De naam en de systematische ontwikkeling van deze methode dateert van omstreeks 1944. In de tweede wereldoorlog werd de allereerste toepassing van deze methode ontwikkeld als een numeriek hulpmiddel voor de ontwikkeling van de atoombom. Meerbepaald om het statistische probleem betreffende random neutronendiffusie in splijtbaar materiaal te simuleren. [36]

Deze methode kan de oplossing schatten van een probleem binnen een bepaalde statistische nauwkeurigheid. Ze werd ontwikkeld om problemen op te lossen waarvoor de klassieke numerieke iteratieschema's bij een lineaire toename van parameters een exponentiële toename in rekentijd nodig hebben.

De Monte Carlo techniek levert benaderde oplossingen voor een wijd gamma van wiskundige problemen.

Voor ons probleem, het ionentransport in vloeibaar-kristalbeeldschermen, levert de eindige differentiemethode ons, in 1D, de exacte oplossing. Het probleem ligt niet in 1D, maar bij de uitbreiding hiervan naar 2D en 3D. De toename van het aantal dimensies, verhoogt de complexiteit en hierdoor neemt de rekentijd exponentieel toe. Met de Monte Carlo methode schatten we de oplossing, hier de concentratieverdeling, na een bepaalde tijd. Waardoor we grote tijdstappen kunnen nemen die de stabiliteit van het algoritme niet in het gedrang brengen. Dankzij deze grote tijdstappen kunnen we de rekentijd drastisch reduceren.

Hoe kan deze techniek gebruikt worden voor ons probleem? Het is duidelijk uit de voorgaande paragraaf dat we de beweging van individuele deeltjes niet kunnen voorspellen, maar wel het gedrag van een verzameling dergelijke deeltjes. Uit de vorige paragraaf weten we ook dat we drie regimes kunnen definiëren, waarvoor we het gedrag van een verzameling deeltjes analytisch kunnen beschrijven.

De Monte Carlo methode die ik hier voor dit probleem zal gebruiken werkt in 1D als volgt. We beschouwen voorlopig de afzonderlijke deeltjes. Ieder individueel deeltje start op het tijdstip  $t$  op een bepaalde plaats  $z$ . We bepalen dan de waarschijnlijkheidsdistributie waarin het deeltje zou kunnen zitten na de tijdstap  $\Delta t$ . En zetten het deeltje op zijn nieuwe positie volgens de distributie. Die nieuwe positie wordt bepaald door een randomestimatorfunctie. Dit is een random getallengenerator die getallen volgens een bepaalde waarschijnlijkheidsdistributie genereert.

De posities van de individuele deeltjes zijn continu verdeeld over het medium, om de concentratieverdeling te bekomen nemen we een histogram van alle deeltjes. Uit de concentratieverdeling volgt

automatische de ladingsverdeling die dan weer een invloed op het elektrische veld kan veroorzaken.

Op die manier schatten we de oplossing door dit voor voldoende deeltjes te doen. We doen dit voor de drie gedefinieerde regimes, waar de oplossing analytisch kan bepaald worden, wanneer we voldoende verwijderd zijn van de overgangen tussen de regimes. Deze Monte Carlo methode benadert de analytische oplossing voor elk regime, op wat random ruis na.

Het probleem ligt bij de overgangen van de regimes. De keuze van het best passende regime is de belangrijkste benadering in dit probleem. Wat zijn de overgangen tussen de regimes? En welk criterium moeten we hanteren om het beste passende regime te bepalen?

Dit zijn de vragen waarvoor ik een oplossing gezocht heb. De analytische uitwerking van dit probleem wordt in dit hoofdstuk behandeld in 1D. De uitbreiding van deze Monte Carlo methode naar 2D is het onderwerp van het volgende hoofdstuk.

### 2.3 Meta-ionen

Om de rekentijd van het ionentransport algoritme te reduceren is door gebruik te maken van meta-ionen. De meta-ionen gedragen zich zoals de individuele ionen. Hun mobiliteits- en de diffusietensor is deze van één enkel ion, maar een meta-ion stelt  $x$  ionen voor, allen op dezelfde positie als de positie van het meta-ion. Nemen we als voorbeeld een beeldpunt met een oppervlak van  $0.09 \text{ mm}^2$  met een dikte van  $5 \text{ }\mu\text{m}$  waarin een ionsoort zit met concentratie van  $9 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ . In deze testcel zitten er dan eigenlijk



$4.05 \times 10^7$  ionen. Gebruiken we 100.000 meta-ionen, dan stelt 1 meta-ion 405 ionen voor. Dit kan de rekentijd erg verkorten en aangezien één enkel ion een lading heeft van  $q = Z.e$  ( $e = \text{elementaire lading } 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ , meestal  $Z = 1$ ), zijn er toch een behoorlijk aantal nodig om een significante verstoring van de lokale potentiaal met zich mee te brengen.

Dit is enkel een rekentechnisch middel om de rekentijden binnen redelijke grenzen te houden. Het gebruik van meta-ionen zal voornamelijk weerslag hebben op de concentratiedistributie. Het effect van deze benadering zal ik later in dit hoofdstuk bespreken.

## 2.4 De verschillende regimes

De aanwezigheid van wanden in de cel zorgt voor randvoorwaarden. We hebben drie verschillende regimes gedefinieerd waarin de meta-ionen kunnen verkeren (beweging ver van de wand, dynamische evenwicht nabij een wand en diffusie vanaf een wand). Om het selectiecriterium tussen de regimes op te stellen, moet eerst de analytische oplossing voor elk regime bepaald worden. De verplaatsing van een meta-ion wordt bepaald door het regime waarin het zich bevindt.

Ik zal de verschillende regimes bespreken voor geladen deeltjes in het ééndimensionale geval. Dit laat achteraf ook de mogelijkheid toe om de resultaten van dit 1D Monte Carlo algoritme te vergelijken met het vertrouwde 1D Finite Difference (FD) algoritme [30].

### 2.4.1 Drift en diffusie ver van de wand

De bewegingsvergelijking voor ionentransport in één dimensie (1.31) kan in een homogeen elektrische veld analytisch opgelost worden voor de beginvoorwaarde dat  $N_0$  deeltjes per oppervlakte eenheid zich bij  $z = 0$  bevinden bij  $t = 0$  ( $E(z, t) = c^{te}$ ) (2.1).

$$\frac{\partial n^{\pm}}{\partial t} = \mp \mu E_z \frac{\partial n^{\pm}}{\partial z} + D \frac{\partial^2 n^{\pm}}{\partial z^2} \quad (2.1)$$

$$\frac{n^{\pm}(z, t)}{N_0^{\pm}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \cdot e^{-\frac{(z \mp vt)^2}{4D t}} \quad (2.2)$$

De functie (2.2) stelt de normale verdeling voor, met  $N_0$  de totale deeltjesconcentratie,  $v$  de snelheid,  $\bar{z}$  de gemiddelde  $z$ -waarde (2.3) en de standaard deviatie  $\sigma$  (2.4).

$$\bar{z} = v \cdot t = \mu \cdot E \cdot t \quad (2.3)$$

$$\sigma = \sqrt{2D \cdot t} \quad (2.4)$$

Dit regime stelt het algemene geval voor van drift en diffusie in de vrije ruimte voor een willekeurig tijdstip  $t$ .

### 2.4.2 Steady state oplossing (drift en diffusie nabij een wand)

Als een spanning over de cel is aangelegd verzamelen de geladen deeltjes, na lange tijd ( $t \rightarrow \infty$ ), zich in een evenwichtsverdeling nabij de wanden. Deze verdeling verandert dan niet meer met de tijd, er heeft zich een dynamisch evenwicht ingesteld tussen drift

naar de wand toe en diffusie van de hoge concentratie aan de wand weg. We kunnen ze gemakkelijk afleiden door de afgeleide naar de tijd in de bewegingsvergelijking (2.1) gelijk aan nul te stellen.

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= 0 \\ D \cdot \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \mp \mu \cdot E \cdot \frac{\partial n}{\partial z} &= 0\end{aligned}\quad (2.5)$$

Lossen we vergelijking (2.5) op voor positief geladen deeltjes die onder invloed van een homogeen negatief elektrisch veld naar een wand op positie  $z = d$  bewegen, dan vinden we (2.6). Hierin heb ik gebruik gemaakt van de Einstein diffusie relatie (1.25).

$$n(z, t = \infty) = \frac{N_0}{D/v} \cdot e^{\frac{z-d}{D/v}} \quad (2.6)$$

Dit is een exponentiële distributie die zich uitstrekt vanaf  $z = d$  tot  $-\infty$  (zie figuur 1.14). De steilheid wordt bepaald door de factor  $D/v$  of  $Ze/(E \cdot kT)$  en is enkel afhankelijk van de valentie van de deeltjes, de temperatuur en het elektrische veld.

De gemiddelde  $z$ -waarde van deze distributie is (2.7), de standaard deviatie wordt gegeven door  $\sigma = D/v$  (2.8) [37].

$$\begin{aligned}\bar{z} &= \int_{-\infty}^d \frac{n(z)}{N_0} \cdot z dz \\ \bar{z} &= d - D/v\end{aligned}\quad (2.7)$$

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \int_{-\infty}^d \frac{n(z)}{N_0} (z - \bar{z}) \cdot dz \\ \sigma^2 &= \left(D/v\right)^2\end{aligned}\quad (2.8)$$

Op analoge wijze is voor een wand aan  $x = 0$  de gemiddelde positie  $\bar{z} = D/v$  en de standaard deviatie  $\sigma = D/v$ .

### 2.4.3 Diffusie vanaf een wand

Beide voorgaande regimes zijn voor de meeste situaties voldoende. Vertrekken we van een homogene verdeling van de deeltjesconcentratie. Dan schuift deze uniforme verdeling langzaam op naar één van de wanden van de cel (afhankelijk van de lading van de deeltjes en het aangelegde veld). Dus gaan de deeltjes in het drift en diffusie regime, in de vrije ruimte, over naar het steady state regime nabij een wand. (zie figuur 1.15)

Maar er treedt een probleem op, bij verwaarloosbare velden ( $E \approx 0$  V/m) als het deeltje zich dicht bij een wand bevindt. Van een exponentiële distributie is dan geen sprake, want zonder veld is de driftsnelheid nul. En diffusie wordt beïnvloed door de aanwezigheid van de wand op  $z = d$ . De concentratieverdeling in zo'n geval kan analytische worden berekend en is gegeven door (2.9).

$$n(z, t) = 2 \cdot \frac{N_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \cdot e^{-\frac{(z-d)^2}{4Dt}} \quad (2.9)$$

We berekenen ook hiervoor de gemiddelde positie (2.10) en de standaard deviatie uit (2.11).

$$\begin{aligned} \bar{z} &= \int_{-\infty}^d \frac{n(z, t)}{N_0} \cdot z dz \\ \bar{z} &= d - \sqrt{\frac{4Dt}{\pi}} \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n(z,t)}{N_0} (z - \bar{z}) \cdot dz$$

$$\sigma^2 = Dt \left( 2 - \frac{4}{\pi} \right) \quad (2.11)$$

Voor een wand aan  $x = 0$  is de gemiddelde positie  $\bar{z} = \sqrt{4Dt/\pi}$  en de standaard deviatie  $\sigma = \sqrt{Dt(2 - 4/\pi)}$ .

## 2.5 De overgangen tussen de regimes en het selectie criterium

Voor elk meta-ion zoeken we het best passende regime, waarin het meta-ion zich zal bevinden na de tijdstap  $\Delta t$ . Eenmaal dat bepaald is berekenen we de nieuwe positie van het deeltje aan de hand van de distributie van het regime dat van toepassing is. We hebben de keuze uit drie regimes. Ik zet ze even op een rijtje:

- (1) Drift en diffusie ver van een wand. De deeltjes bewegen onder invloed van een elektrisch veld en diffunderen vrijelijk.
- (2) Steady state nabij een wand. De deeltjes zijn verdeeld in een exponentiële distributie nabij de wand. Deze distributie ontstaat door een dynamisch evenwicht tussen drift naar de wand toe en diffusie van de hoge concentratie nabij de wand weg.

- (3) Diffusie nabij een wand. Bij verwaarloosbare veldsterkten speelt enkel diffusie een rol. Door de aanwezigheid van een wand zijn de deeltjes beperkt in hun bewegingsvrijheid.

We schrijven voor elk regime de corresponderende gemiddelde positie  $\bar{z}_j$  ( $j = 1, 2, 3$  stelt respectievelijk de verschillende regimes voor genummerd zoals in de lijst hierboven) na een tijd  $t$  voor een deeltje in beginpositie  $z_0$  in het stelsel (2.12). Let op dit is voor een wand op positie  $z = 0$ .

$$\begin{cases} \bar{z}_1 = z_0 - v \cdot t \\ \bar{z}_2 = \frac{D}{v} \\ \bar{z}_3 = \sqrt{\frac{4Dt}{\pi}} \end{cases} \quad (2.12)$$

Gebruiken we de volgende substitutie  $q = \frac{v}{D} \cdot \bar{z}$  en  $p = \frac{v^2}{D} \cdot t$  dan worden de vergelijkingen in (2.12):

$$\begin{cases} q_1 = q_0 - p \\ q_2 = 1 \\ q_3 = \sqrt{4p/\pi} \end{cases} \quad (2.13)$$

Om de mathematische beschrijving van overgangen tussen de drie regimes te vinden, stellen we de vergelijkingen van dit stelsel aan elkaar gelijk.

- Overgang beweging ver van de wand naar evenwicht nabij de wand ( $1 \rightarrow 2$ ):

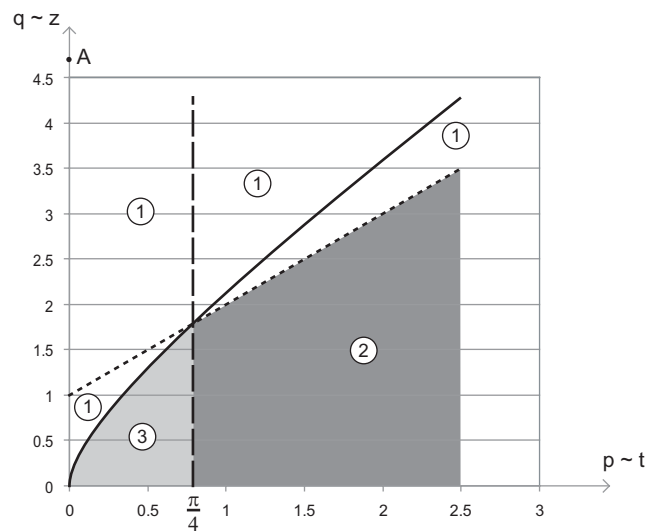
$$q_1 = q_2 \Rightarrow p_{12} = q_0 - 1 \quad (2.14)$$

- Overgang evenwicht nabij de wand naar diffusie vanaf de wand ( $2 \rightarrow 3$ ):

$$q_2 = q_3 \Rightarrow p_{23} = \frac{\pi}{4} \quad (2.15)$$

- Overgang beweging ver van de wand naar diffusie vanaf de wand ( $1 \rightarrow 3$ ):

$$q_1 = q_2 \Rightarrow q_0 = p_{13} + \sqrt{\frac{4}{\pi} p_{13}} \quad (2.16)$$



figuur 2.1: Voorstelling van de werkingsgebieden van de drie regimes.

Figuur 2.1 stelt schematisch de situatie voor.  $q$  is equivalent met de  $z$ -afstand tot een wand. Hier werd de situatie geschetst met een wand op  $z = 0$  ( $q = 0$ ). Het meta-ion beweegt vanuit de bulk naar die wand. De  $p$ -as is equivalent met de tijdsas.  $p = 0$  stelt het begin van de tijdstap  $\Delta t$  voor.

Een meta-ion begint dus op de  $q$ -as, op positie A ( $q_0, 0$ ) in de figuur. De vraag is: In welk gebied ligt het eindpunt B ( $q, p$ ) na een tijdstap  $\Delta t$ ?

Een belangrijke grens is de overgang van diffusie nabij een wand naar het steady state regime, voorgesteld door vergelijking (2.15) en op figuur 2.1 als de streepjeslijn ( $p = \pi/4$ ).

Is  $p$  groter dan  $\pi/4$ , dan gebruiken we de overgang van drift en diffusie naar de exponentiële verdeling (tussen regime 1 naar 2), dit is wiskundig gegeven door vergelijking (2.14) en op figuur 2.1 als de stippellijn. Het stelsel (2.17) stelt de voorwaarden voor om in regime 2 (steady state) te vallen. Dit beslaat een gebied dat in figuur 2.1 gekleurd is in het donkergrijs.

$$\begin{cases} p > \frac{\pi}{4} \\ p > q_0 - 1 \end{cases} \quad (2.17)$$

Is echter  $p$  kleiner dan  $\pi/4$ , dan telt de overgang van drift en diffusie naar diffusie nabij een wand (van regime 1 naar 3), vergelijking (2.16) is de overgang (de volle lijn in figuur 2.1). Dan stelt het stelsel (2.18) de voorwaarden voor om in regime 3 (diffusie nabij wand) te vallen. Dit gebied is lichtgrijs gekleurd in figuur 2.1.

$$\begin{cases} p < \frac{\pi}{4} \\ q_0 < p + \sqrt{\frac{4}{\pi} p} \end{cases} \quad (2.18)$$



Is er noch aan (2.17) noch aan (2.18) voldaan dat zitten de geladen deeltjes in regime 1 (drift en diffusie in de vrije ruimte), in figuur 2.1 is dit gebied ongekleurd.

Het Monte Carlo algoritme benadert de analytische oplossing in elk van de drie regimes wanneer we voldoende ver verwijderd zijn van de overgangen tussen de regimes. De procedure hierboven is het selectiecriteria om te kiezen welk regime van toepassing is. In de volgende paragrafen bespreek ik de implicaties hiervan.

## **2.6 Implementatie deeltjestransport**

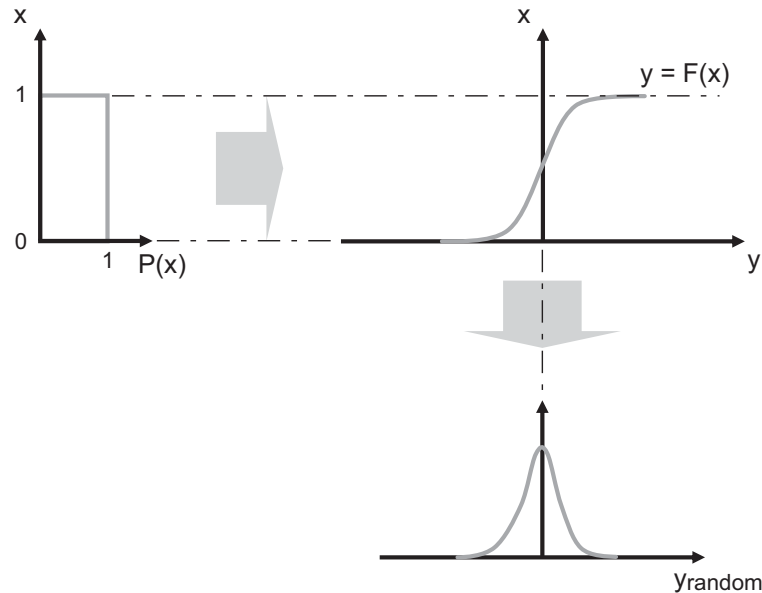
Nu ik de drie regimes uitgewerkt heb en we weten welke criteria de keuze van het regime vastleggen, kunnen we aan de implementatie van het transport van de meta-ionen beginnen.

### **2.6.1 De Monte Carlo Estimatorfunctie**

De estimatorfunctie vormt de basis van dit Monte Carlo algoritme. De randomfunctie, die in elke programmeertaal bijgeleverd zit, genereert random getallen die verdeeld zijn volgens een uniforme distributie. De estimatorfunctie is een wiskundige constructie om van de randomfunctie, een gewenste distributie te bekomen (bijv. een normale verdeling of een exponentiële verdeling).

Figuur 2.2 stelt schematisch de werking van een estimatorfunctie voor om een randomgenerator te maken met een waarschijnlijkheidsverdeling  $f$ .  $F$  stelt de cumulatieve functie van  $f$  voor. De getallen uit de random generator, met een uniforme

verdeling, worden als input gebruikt voor de inverse functie van de cumulatieve waarschijnlijkheidsverdeling  $F^{-1}(x)$ . Het resultaat is een randomgenerator met een verdeling  $f(y)$ , dit noemen we een estimatorfunctie.



Figuur 2.2: schematisch voorstelling van de werking van een estimator.

Het belangrijkste is dus het bestaan van de inverse functie van de cumulatieve waarschijnlijkheidsverdeling.

### 2.6.1.1 De normale verdeling

De normale verdeling is gegeven door (2.19),  $\sigma$  stelt de standaarddeviatie voor, het gemiddelde is  $\bar{x} = 0$ .

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (2.19)$$

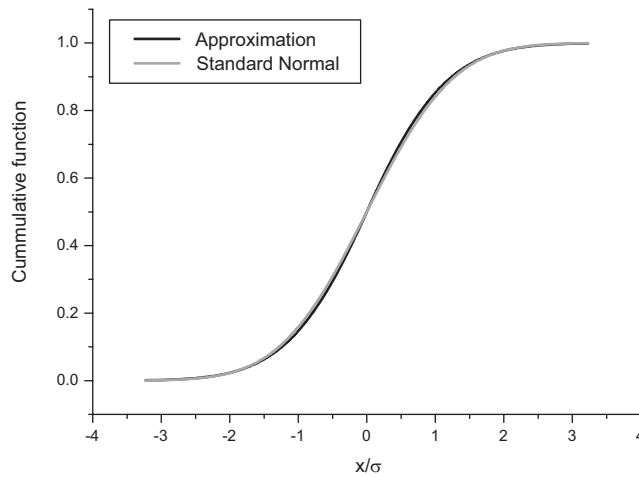
De cumulatieve van de normale verdeling is gegeven door (2.20).

$$F(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx \quad (2.20)$$

Het probleem met deze cumulatieve is dat ze niet inverteerbaar is, daarom gebruik ik de benadering  $\tilde{F}(x)$  (2.21) met  $a = \frac{1}{\sigma^2\pi}$  en

$b = \frac{2\sqrt{2}}{\sigma\pi}$ , waarvan wel de inverse functie kan berekend worden.

$$\begin{cases} \tilde{F}_{x \geq 0}(x) = 1 - \frac{1}{2} e^{-ax^2 - bx} \\ \tilde{F}_{x < 0}(x) = \frac{1}{2} e^{-ax^2 + bx} \end{cases} \quad (2.21)$$



**Figuur 2.3: De vergelijking van de cumulatieve van de standaard normale verdeling  $F(x/\sigma)$  met de gekozen approximatie  $\tilde{F}(x/\sigma)$ .**

De vergelijking tussen de twee cumulatieve functies is te zien in figuur 2.3. Het is duidelijk dat de benadering voorgesteld in (2.21) bruikbaar is voor ons algoritme.

De inverse van de vergelijkingen (2.21) vinden we gemakkelijk als we  $x = \tilde{F}^{-1}(r)$  stellen.

$$\begin{aligned} x_n^{r \geq 0.5}(r, \sigma) &= \frac{1}{2a} \cdot \left( -b + \sqrt{b^2 - 4a \ln(2 - 2r)} \right) \\ x_n^{r < 0.5}(r, \sigma) &= \frac{1}{2a} \cdot \left( b - \sqrt{b^2 - 4a \ln(2r)} \right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

De variabele  $r$  ( $r \in ]0, 1[$ ) wordt geleverd door de random generator met een uniforme verdeling. Indien we dit voldoende herhalen bekomen we een verzameling deeltjes die normaal verdeeld is.

Deze estimatorfunctie wordt gebruikt om diffusie statistisch te benaderen, als we voor de standaard deviatie  $\sigma$  (2.4) gebruiken. In het meerdimensionele geval zullen we verder met  $x_n$  de estimator met normale verdeling in de  $X$ -richting aanduiden,  $y_n$  deze in de  $Y$ -richting en  $z_n$  voor de  $Z$ -richting.

### 2.6.1.2 De exponentiële verdeling

De exponentiële verdeling wordt gegeven door (2.23), de cumulatieve ervan door (2.24) met  $0 < x < \infty$ .

$$f(x) = \alpha \cdot e^{-\alpha x} \quad (2.23)$$

$$F(x) = \int_0^x f(x) dx = 1 - e^{-\alpha x} \quad (2.24)$$

De cumulatieve functie (2.24) is inverteerbaar en stellen we  $x = F^{-1}(r)$  met  $r \in ]0, 1[$  dan is het resultaat:

$$x_e(r, \alpha) = -\frac{\ln(1-r)}{\alpha} \quad (2.25)$$

Nemen we voldoende deeltjes dan levert dit een exponentiële verdeling op. Dit wordt gebruikt om het steady state regime nabij een wand te berekenen.

In het meerdimensionele geval zullen we verder met  $x_e$  de estimator met normale verdeling in de  $X$ -richting aanduiden,  $y_e$  deze in de  $Y$ -richting en  $z_e$  voor de  $Z$ -richting.

## 2.6.2 Het transport per regime

Voor elk meta-ion dat aan het begin van de volgende tijdstap  $\Delta t$  een beginpositie  $z_0$  heeft, moeten we het te gebruiken regime bepalen. De keuze van het regime gebeurt door gebruik te maken van de stelsels (2.17) en (2.18), waarin we de volgende substituties gebruiken:

$$q_0 = \frac{v}{D} \cdot z_0 \quad (2.26)$$

$$p = \frac{v^2}{D} \cdot \Delta t \quad (2.27)$$

We hebben afhankelijk van het regime drie mogelijkheden om de nieuwe  $z$ -positie  $z_1$  van het meta-ion na de tijdstap  $\Delta t$  te berekenen.

1. Drift en diffusie in de vrije ruimte, met  $\sigma = \sqrt{2D\Delta t}$

$$z_1 = z_0 + v \cdot \Delta t + z_n(r, \sigma) \quad (2.28)$$

2. Steady state nabij een wand, met  $\alpha = v/D$

$$z_1 = z_e(r, \alpha) \quad (2.29)$$

3. Diffusie nabij een wand, met  $\sigma = \sqrt{2D\Delta t}$

$$z_1 = |z_n(r, \sigma)| \quad (2.30)$$

Merk op dat de positie berekend met de estimatorfuncties voor een individueel meta-ion als willekeurig kan worden beschouwd, maar dat de beweging van alle meta-ionen samen zorgt voor een correcte verdeling.

Om na het ionentransport over een concentratie te kunnen spreken, nemen we een histogram van de deeltjesposities. Deze histogramberekening is noodzakelijk om de interactie van de concentratieverdeling met het elektrische veld te kunnen berekenen. De meta-ionen onderling beïnvloeden elkaar dus niet. Enkel via de verstoring van het elektrische veld beïnvloeden ze elkaar's beweging. De tweede noodzaak van de histogramberekening is om het interval te zoeken waarin een meta-ion zich bevindt. In de snelheidsberekening wordt namelijk de waarde genomen van het lokale elektrische veld.

Eenmaal we terug een concentratieverloop hebben is de berekening van de veldverdeling volledig gelijk aan het FD eendimensionale geval.

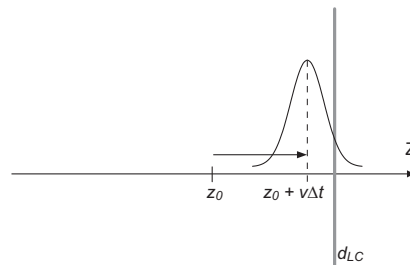
## 2.7 Problemen van deze benadering

Een probleem dat regelmatig optreedt, is de beperking van de meta-ionen tot het vloeibaar-kristalmedium. De estimatorfuncties met normale verdeling is niet begrensd.

Dit probleem is geïllustreerd in figuur 2.4. De positie van een meta-ion voor de tijdstap is  $z_0$ , het selectie criterium bepaalde dat we regime 1 gebruiken. De driftverplaatsing levert geen probleem, maar in de figuur kunnen we duidelijk zien dat de diffusieverplaatsing een kans heeft om het meta-ion buiten de grenzen van het vloeibaar-kristalmedium te plaatsen. Indien dit ook effectief gebeurt, dan beschouwen we dit als drift en diffusie nabij een wand. De verplaatsing buiten het medium kan geïnterpreteerd worden als minstens één botsing van het meta-ion met die wand en dus wordt de beweging van dit meta-ion bepaald door regime 2 of door de exponentiële verdeling.

Dit probleem kan ook optreden zonder de aanwezigheid van een elektrisch veld. In dat geval interpreteren we dit opnieuw als minstens één botsing met de wand en wordt het meta-ion verplaatst volgens regime 3 of diffusie vanaf de wand.

Deze kleine correcties voor het Monte Carlo algoritme zijn onontbeerlijk om een vloeiend samenspel van de drie regimes te garanderen.



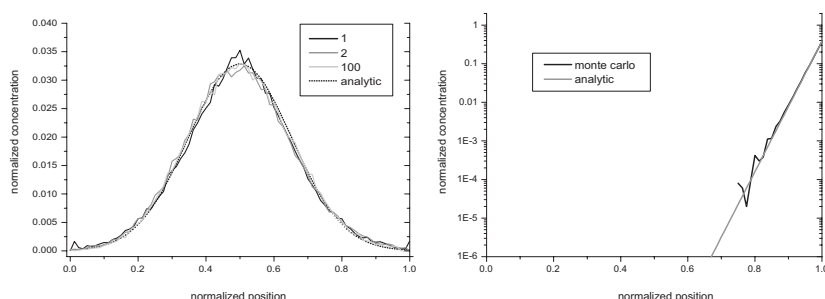
**Figuur 2.4: Illustratie van een veelvoorkomend probleem aan de wand.**

## 2.8 De Nauwkeurigheid

Hoe nauwkeurig is deze benadering? Als test simuleren we de volgende situatie. De beginsituatie is een deltadistributie bij de oorsprong  $\delta(z)$  van éénwaardig geladen ionen ( $Z = 1$ ). De simulatieparameters staan in tabel 2-1. We gebruiken 50.000 meta-ionen.

<i>spanning <math>V</math></i>	<i>1 V</i>
<i>Dikte LC (<math>d_{lc}</math>)</i>	$4 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Dikte AL (<math>d_{al}</math>)</i>	$50 \times 10^{-9} \text{ m}$
$\epsilon_{LC}$	3
$\epsilon_{AL}$	2
$n^{\pm}$	$8.9 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$
$\mu^{\pm}$	$6.2 \times 10^{-10} \text{ m}^2/Vs$
<i>Aantal intervallen</i>	80

Tabel 2-1: De parameterwaarden om de nauwkeurigheid van het algoritme te testen.



Figuur 2.5: Kwantitatief vergelijk tussen de gesimuleerde verdelingen met de analytische oplossing van normale verdeling (a, links) en de exponentiële verdeling (b, rechts).



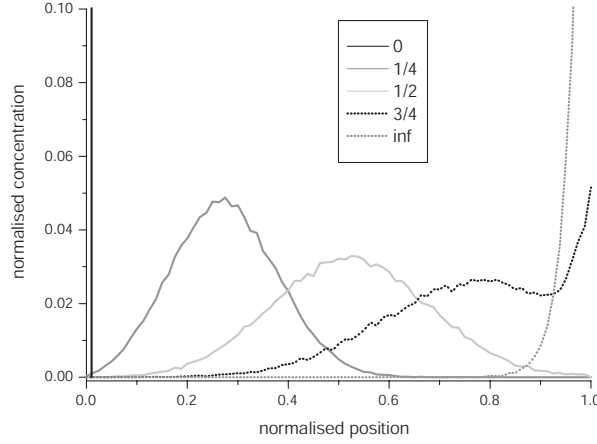
De kwantitatieve vergelijking van de gesimuleerde distributies met de analytische oplossingen wordt gegeven door figuur 2.5. Het oppervlak onder de curven is genormeerd op één. Op de linkse figuur (a) wordt de Monte Carlo verdeling “ $\frac{1}{2} d_{lc}$ ” (= dat tijdstip en die positie waarop de gemiddelde positie van de verdeling exact in het midden van de structuur valt) na 1, 2 en 100 tijdstappen vergeleken met de analytische oplossing van de normale verdeling (2.19). Het valt op dat, op wat random-ruis na, deze perfect samenvallen. Het resultaat voldoet aan de verwachting en is onafhankelijk van de gebruikte tijdstap.

De estimatorfunctie voor diffusie is in goede overeenkomst met de analytische oplossing.

De rechtse figuur 2.5 (b) toont de overeenkomst met de verdeling op  $t \rightarrow \infty$  met de exponentiële verdeling (2.23). Dit resultaat van de Monte Carlo methode werd bekomen door het samenspel van de drie regimes. Een deeltje in het exponentiële regime kan terug in de bulk geplaatst worden, waardoor het in de volgende tijdstap terug kan drijven naar de wand. Of een deeltje te dicht tegen de wand kan bij een kleine tijdstap in het diffusie vanaf de wand regime terecht komen. De overeenkomst met de FD methode is treffend. Dit is niet evident en bewijst dat de estimatorfuncties goed werken en we dit algoritme voor een werkelijke situatie kunnen gebruiken.

Figuur 2.6 toont de concentratieverdeling van de positieve ionen voor vier tijden aan. Drie duiden de positie aan die de distributie zou gehad hebben indien ze niet zou verbreden door diffusie, op  $\frac{1}{4} d_{lc}$  ( $t = 6.6 \text{ ms}$ ),  $\frac{1}{2} d_{lc}$  ( $t = 13.2 \text{ ms}$ ) en op  $\frac{3}{4} d_{lc}$  ( $t = 19.8 \text{ ms}$ ), samen met de situatie bij  $t \rightarrow \infty$ . Er valt duidelijk te zien dat de distributie breder wordt naarmate de verdeling opschuift naar de andere zijde van de LC cel. Bij de verdeling “ $\frac{3}{4} d_{lc}$ ” beginnen de eerst aangekomen ionen zich in een exponentiële verdeling op te stapelen

nabij de wand. Dit illustreert mooi de vlotte overgang van de belangrijkste regimes 1 en 2.



**Figuur 2.6:** De concentratieverdeling van de positieve ionen voor vier tijden.

De statistische ruis is het enige wat als een nadeel kan gezien worden. Het ruisniveau  $\Delta N$  op elk interval is de vierkantswortel van het aantal deeltjes  $N$  in dat interval (2.31).

$$\Delta N = \sqrt{N} \quad (2.31)$$

Deze kan gemakkelijk verkleind worden door meer meta-ionen ( $N$ ) te gebruiken, om zo de analytische oplossingen beter te benaderen.

$$\text{relative noise level} = \frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (2.32)$$

Het nadeel van meer deeltjes te gebruiken is onvermijdelijk de langere rekentijd.

## 2.9 De terugkoppeling van de ladingsdistributie.

De concentratiedistributie van geladen deeltjes heeft automatisch aanleiding tot een ladingsdistributie. Tot hiertoe hebben we de ionenconcentratie voldoende laag gekozen om geen verstoring van het elektrische veld te hebben. Zo zijn we conform met de situatie uit paragraaf 2.2 ( $E = c^{te}$ ). In de praktijk is dit een illusie, omdat het ionentransport, meer bepaald de opstapeling nabij de wanden, lokaal kan zorgen voor hoge concentraties die het lokale veld ernstig kunnen verstoren.

In hoofdstuk 1 ben ik dieper ingegaan op deze materie (zie paragraaf 1.6.4), ik neem hier de belangrijkste formules over die van belang zijn voor het in rekening brengen van de veldverstoring bij passieve matrixaansturing. We nemen ladingsneutraliteit aan met twee ionsoorten, één positieve en één negatieve soort.

Het veld in de LC-laag wordt gegeven door (2.33). Het is een combinatie van de lading  $Q_0$  op de elektrodes, met oppervlakte  $S$ , van de cel als er een spanning  $V_0$  aangelegd wordt. Samen met de ionaire beweging in de cel, die de lading  $Q_{el}(t)$  induceert op de elektrodes.  $Q_{el}(t)$  is nul bij  $t = 0$ .

$$E_{0 < z < d_{LC}}(z, t) = \frac{Q_0 + Q_{el}(t)}{\epsilon_0 \epsilon_{LC} S} + \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_{LC}} \int_0^z (Z^+ n^+(z', t) - Z^- n^-(z', t)) dz' \quad (2.33)$$

Waarin  $n^\pm(z, t)$  de concentratieverdeling van respectievelijk de positieve en de negatieve ionen voorstelt, analoog voor de valentie  $Z^\pm$ .

De stroom veroorzaakt door de ionenbeweging wordt gegeven door (2.34).

$$I(t) = \frac{dQ_{el}(t)}{dt} \quad (2.34)$$

## 2.10 De vergelijking met het Finite Difference programma.

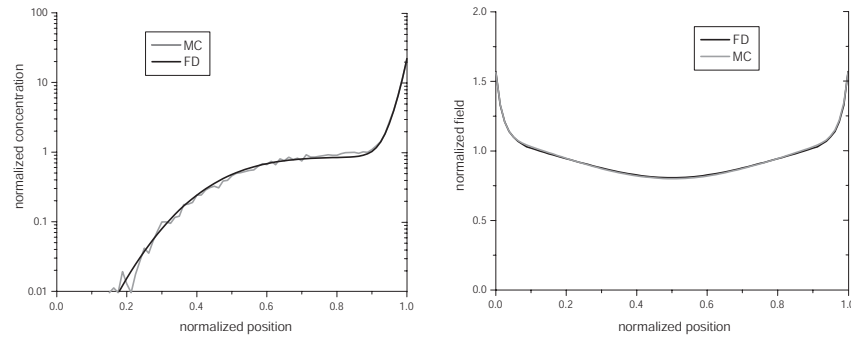
Om de resultaten van dit Monte Carlo algoritme te evalueren, vergelijken we de resultaten met die van het ons vertrouwde FD-programma. De simulatieparameters zijn gegeven in tabel 2-2. We starten met een homogene verdeling van de meta-ionen. De beginsituatie voor een typische stroommeting.

<i>spanning <math>V</math></i>	<i>1 V</i>
<i>Dikte LC(<math>d_{lc}</math>)</i>	$4 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Dikte AL (<math>d_{al}</math>)</i>	$50 \times 10^{-9} \text{ m}$
$\epsilon_{LC}$	3
$\epsilon_{AL}$	2
$n^{\pm}$	$8.9 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$
$\mu^{\pm}$	$6.2 \times 10^{-10} \text{ m}^2/Vs$
<i>Aantal intervallen</i>	80

**Tabel 2-2: De parameter waarden om de nauwkeurigheid van het algoritme te testen.**

Figuur 2.7 toont de situatie na 15 ms. De linkse figuur 2.7(a) toont de genormeerde concentratieverdeling (genormeerd op de initiële concentratie) van enkel de positieve ionen voor het FD en het MC algoritme. De overeenkomst tussen beide algoritmes is zeer goed.

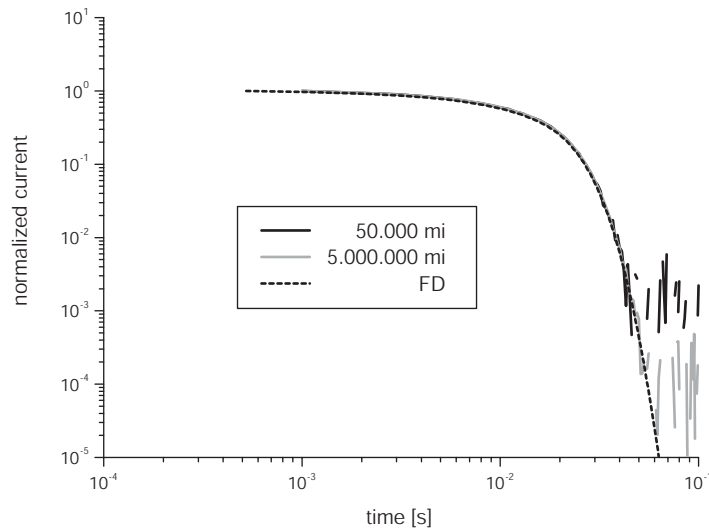
De verdeling van de negatieve ionen is analoog maar uiteraard gespiegeld om het midden van de cel. Op de rechtse figuur 2.7(b) is duidelijk de invloed van de ladingsverdeling op het genormeerde elektrische veld te zien. Dit is symmetrisch omdat de ionen dezelfde mobiliteit hebben en een tegengesteld teken.



**Figuur 2.7: Vergelijking tussen het FD en het MC algoritme (a) voor het concentratieverloop van de positieve ionen (links) en (b) het elektrische veld.**

Een tweede belangrijke test is het vergelijken van de stromen. Zoals gezegd worden deze stromen geïnduceerd door het ionentransport in de cel. Het vormt een belangrijk middel om de simulaties te vergelijken met de metingen. Figuur 2.8 toont de stroomberekening voor het FD algoritme en twee keer het MC algoritme (met  $5 \times 10^4$  en met  $5 \times 10^6$  meta-ionen).

De resultaten zijn uitstekend. We zien ook duidelijk het effect van het aantal gebruikte meta-ionen. Voor de berekening met  $5 \times 10^6$  meta-ionen is het ruisniveau op de stroom 10 keer lager ligt dan van  $5 \times 10^4$  meta-ionen. De rekentijd is echter met een factor 100 toegenomen.



**Figuur 2.8: Stroomberekening voor het FD algoritme en het MC algoritme (met 50.000 en met 5.000.000 meta-ionen)**

## 2.11 Besluit.

De resultaten van het Monte Carlo algoritme besproken in dit hoofdstuk stemmen goed overeen met die van het originele Finite Difference algoritme. Het is een bruikbaar algoritme om ionentransport te berekenen in vloeibaar-kristalcellen. Het random karakter van dit algoritme limiteert de nauwkeurigheid van de berekeningen, zodat de resultaten niet de nauwkeurigheid kunnen bereiken dat met het FD algoritme wel kan bereikt worden.

Toch heeft dit algoritme één grote sterkte: de tijdstappen zijn onafhankelijk van de mobiliteit van de snelste ionen. Hierdoor kunnen veel grotere tijdstappen gebruikt worden dan het FD algoritme zonder de stabiliteit van het programma in gevaar te brengen.

We kunnen dus grote tijdstappen nemen, maar we moeten zeer veel meta-ionen gebruiken om de nauwkeurigheid te verhogen. Hoe dit een voordeel kan worden wordt duidelijk in het volgende hoofdstuk en in de toepassingen van dit algoritme.





## Hoofdstuk 3

# Monte Carlo algoritme in de continue ruimte (2D)

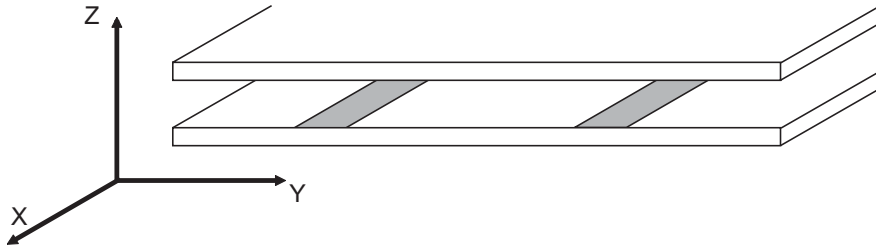
Na in hoofdstuk 2 het basisprincipe van het Monte Carlo algoritme in de continue ruimte te hebben uitgelegd, wordt in dit hoofdstuk de belangrijkste toepassing van dit algoritme uitgewerkt. De tweede dimensie wordt ingevoerd.

De drie regimes blijven geldig voor die richting waarin de aanwezigheid van de wand de bewegingsruimte beperkt. In de extra ingevoerde dimensie is er geen fysische beperking voor de deeltjes. Om het probleem handelbaar te houden voeren we periodieke randvoorwaarden in. Omdat er in deze richting geen botsingen met de wand voorkomen volstaat de beschrijving van drift en diffusie in de bulk voor de ingevoerde dimensie.

De invoering van de tweede dimensie zal aanpassingen vragen in de implementatie van de drie regimes. De uitwerking van deze aanpassingen kunt vinden in de volgende paragrafen

### 3.1 Het coördinatenstelsel en de rekenruimte

Het invoeren van de tweede dimensie vraagt om duidelijke afspraken over het coördinatenstelsel. We gebruiken een rechtshandig coördinatenstelsel. Het tweedimensionale vlak waarin de berekeningen worden uitgevoerd is het  $YZ$ -vlak. De  $Z$ -richting is loodrecht op de glasplaten, de  $Y$ -richting parallel ermee. Figuur 3.1 toont de definities voor een structuur met langwerpige elektrodes gelegen volgens de  $X$ -richting.



**Figuur 3.1:** Coördinatenstelsel voor de tweedimensionale berekening.

De  $X$ -richting is dus loodrecht op het  $YZ$ -vlak en steekt naar voor, naar de kijker toe, uit het  $YZ$ -vlak. Conform met de afspraken in Hoofdstuk 1 is de hoek tussen de positieve  $X$ -as en de projectie van de director  $\vec{n}$  op het  $XY$ -vlak de twisthoek  $\varphi$ .

In de  $Z$ -richting is de rekenruimte uiteraard begrensd door de aanwezigheid van de glasplaten. Het randvoorwaardenprobleem voor de  $Z$ -richting is hetzelfde als voor het eendimensionale geval.

In de  $Y$ -richting veronderstellen we periodieke randvoorwaarden, en we beperken de beschrijving tot een interval  $[y_{min}, y_{max}]$ . Het aantal ionen dat, per tijdseenheid, de maximale  $y$ -positie  $y_{max}$  overschrijdt is gelijk aan het aantal dat er bij  $y_{min}$  terug binnenkomen. En vice

versa. Dankzij deze periodieke randvoorwaarden hebben we in de  $Y$ -richting maar één regime: drift en diffusie ver van de wand.

## 3.2 De director en de potentiaal

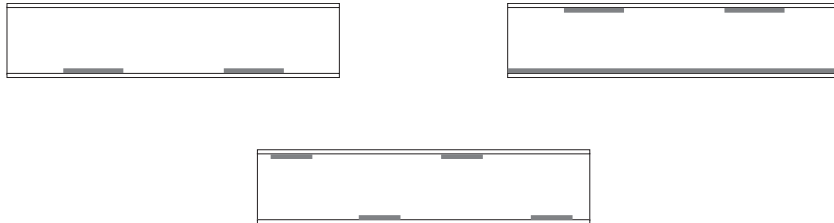
Om het ionentransport in het tweedimensionaal vloeibaar-kristalmodel (2D vloeibaar-kristalmodel) te berekenen, moeten we eerst en vooral beschikken over een simulatiepakket om de directorbewegingen en de veldpatronen uit te rekenen. Hiervoor werd samengewerkt met de Optical System and Devices Group van University College London (UCL). Deze groep heeft een tweedimensionaal vloeibaar-kristalmodel ontwikkeld gebaseerd op de eindige elementen methode (Finite Elements: FE) [38]. Het ionentransport algoritme werd als een module ingebouwd in dit pakket [39, 40].

### 3.2.1 GiD en de definitie van de rekenstructuur

Het invoeren van de tweede dimensie heeft aanleiding tot een enorm aantal nieuwe mogelijkheden. In het eendimensionale geval zijn er twee elektrodes voorgesteld als oneindig grote vlakken. En verschilt de cel-lay-out voornamelijk in variabele diktes van de vloeibaar-kristallaag en de aligneringslagen. In 2D kunnen de elektrodes een breedte krijgen en worden ze voorgesteld als oneindig lange rechthoeken. De positie van deze elektrodes op de glasplaten kan ook variëren. En daarenboven zijn we niet beperkt tot twee elektrodes.

Al deze nieuwe mogelijkheden moeten dan ook ondubbelzinnig gedefinieerd worden. Hiervoor gebruiken we het software pakket GiD (Geometry and Data) [41]. GiD werd ontwikkeld als een universele, adaptieve en gebruiksvriendelijke grafische user interface voor geometrisch modelleren, data input en visualisatie van de resultaten van alle types van numerieke simulatieprogramma's. Vooral het definiëren van de geometrie en het toekennen van de materialen aan elementen in de rekenstructuur zijn de belangrijkste toepassingen van GiD in dit 2D-LC simulatie pakket [42].

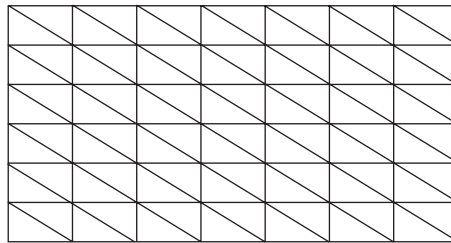
Figuur 3.2 toont enkele voorbeelden van gebruikte rekenstructuren. We zien telkens de vloeibaar-kristallaag tussen twee aligneringslagen, de elektrodes zijn aangeduid als dikke lijnen. Hoewel dit nog niet expliciet vermeld werd kunnen enkel structuren berekend worden met een rechthoekige vloeibaar-kristallaag. In ons model hebben de elektrodes geen dikte. Dit is de voornaamste beperking van dit algoritme en zal verder besproken worden bij de bespreking van de implementatie.



**Figuur 3.2: Enkele voorbeelden van rekenstructuren.**

### 3.2.2 Van potentiaal naar elektrisch veld

Het 2D vloeibaar-kristalmodel berekent de potentiaalverdeling in de 2D rekenstructuur, zodat we hieruit het elektrische veld kunnen berekenen. Dit 2D model werkt met gelijk gespatieerde intervallen in beide richtingen. Hoewel dit op het eerste zicht lijkt op een eindige differentie methode (FD) zijn de driehoekige elementen gevormd door van elk rechthoekig tweedimensionaal interval de diagonaal van linksboven naar rechtsonder te trekken (zie figuur 3.3).



**Figuur 3.3: Opbouw van de driehoekige elementen uit gelijkgespatieerde intervallen.**

Dankzij deze gelijkgespatieerde intervallen kunnen we gemakkelijk het elektrische veld afleiden uit de potentiaal. We maken gebruik van de gekende formule (3.1).

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V \quad (3.1)$$

#### 3.2.2.1 Numerieke afgeleiden

Wanneer een functie  $f$  expliciet gegeven is, is het normaal gezien geen probleem om de afgeleide  $f'$  te bepalen en te berekenen in willekeurige punten. In vele problemen in de numerieke analyse is een functie  $f$  niet expliciet gegeven. Omdat men meestal overgaat

op de discretisatie van het vraagstuk,  $N$  gelijke delen met staplengte  $h$ , kunnen we toch de afgeleide  $f'$  bepalen door gebruik te maken van formules (3.2) en (3.3) [43].

$$f'(x_k) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l'_j(x_k) \quad (3.2)$$

$$l_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)} \quad (3.3)$$

De formule (3.2) wordt een  $(n+1)$ -puntsformule genoemd voor de benadering van  $f'(x_k)$ , omdat een lineaire combinatie van  $(n+1)$  functiewaarden  $f(x_j)$  gebruikt wordt. Deze formules worden zeer bruikbaar als de punten equidistant gelegen zijn.

#### Drie-puntsformules:

Lossen we de vergelijkingen (3.2) en (3.3) op voor  $n=2$  ( $j=0, 1, 2$ ) en gebruiken we equidistante punten, met  $x_k = x_0$

$$x_1 = x_0 + h \quad \text{en} \quad x_2 = x_0 + 2h \quad \text{voor een} \quad h \neq 0.$$

Dan verkrijgen we uit (3.2) en (3.3):

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left[ -\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2} f(x_0 + 2h) \right] \quad (3.4)$$

$$f'(x_0 + h) = \frac{1}{h} \left[ -\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_0 + 2h) \right] \quad (3.5)$$

$$f'(x_0 + 2h) = \frac{1}{h} \left[ \frac{1}{2} f(x_0) - 2f(x_0 + h) + \frac{3}{2} f(x_0 + 2h) \right] \quad (3.6)$$

Vervangen we  $x_0$  door  $x_0 - h$  in (3.5) en  $x_0$  door  $x_0 - 2h$  in (3.6) dan bekomen we drie formules om  $f'(x_0)$  te benaderen.

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] \quad (3.7)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [-f(x_0 - h) + f(x_0 + h)] \quad (3.8)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)] \quad (3.9)$$

We vinden de vertrouwde formule voor numerieke afleidingen (3.8) terug. Maar daarnaast hebben we ook nog twee formules die bruikbaar zijn voor afgeleiden aan de rand (3.7) (3.9).

#### Vijf-puntsformules:

Lossen we de vergelijkingen (3.2) en (3.3) op voor  $n=4$  dan vinden we op dezelfde manier:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [-25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) + 16f(x_0 + 3h) - 3f(x_0 + 4h)] \quad (3.10)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [-3f(x_0 - h) - 10f(x_0) + 18f(x_0 + h) - 6f(x_0 + 2h) + f(x_0 + 3h)] \quad (3.11)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] \quad (3.12)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [-f(x_0 - 3h) + 6f(x_0 - 2h) - 18f(x_0 - h) + 10f(x_0) + 3f(x_0 + h)] \quad (3.13)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [3f(x_0 - 4h) - 16f(x_0 - 3h) + 36f(x_0 - 2h) - 48f(x_0 - h) + 25f(x_0)] \quad (3.14)$$

De vijf-puntsafgeleiden worden gebruikt als drie-puntsafgeleiden afwijkingen bij de wanden vertonen. Ik zal bij de bespreking van het algoritme aantonen dat dit voor het Monte Carlo algoritme het geval is. De elektrische veld-vector kunnen we gemakkelijk afleiden door gebruik te maken van bovenstaande formules, rekening houdend met (3.1).

### 3.3 Tweedimensionale snelheid

De snelheidsvector  $\vec{v}$  is in een anisotroop medium altijd driedimensionaal (zie ook hoofdstuk 1). Maar in deze tweedimensionale simulaties houden we geen rekening met de  $X$ -richting, zodat de potentiaal onafhankelijk is van de  $x$ -coördinaat. De gevolgen hiervan zijn, ten eerste de  $x$ -component van het elektrische veld gelijk aan nul,  $E_x = 0$ . En ten tweede negeren we het bestaan van  $v_x$ . De gebruikte snelheidscomponenten zijn:

$$\begin{aligned} v_y &= \mu_{yy}E_y + \mu_{yz}E_z \\ v_z &= \mu_{zy}E_y + \mu_{zz}E_z \end{aligned} \tag{3.15}$$

De  $z$ -component van de snelheid  $v_z$  wordt gebruikt om een keuze te maken voor het gebruik van een regime bij de Monte Carlo berekening. In de  $Y$ -richting is, wegens de periodieke randvoorwaarden, altijd voldaan aan het geval van drift en diffusie in de continue ruimte.

Onderstellen we voor de eenvoud dat een meta-ion zich in het algemene geval van drift en diffusie in de vrije ruimte bevindt. We



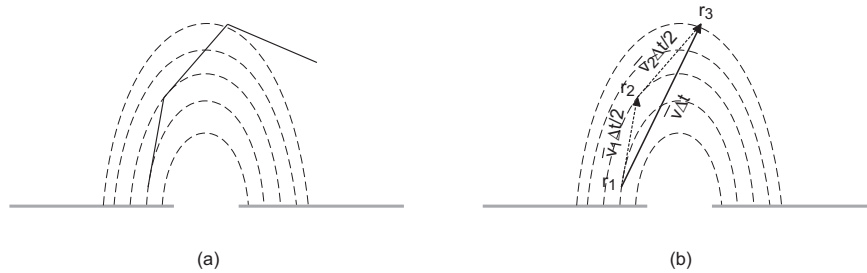
kunnen dan formule (2.28) herschrijven voor het meerdimensionale geval.

$$\vec{r}(y, z) = \vec{r}_0(y_0, z_0) + \vec{v}\Delta t + \vec{r}_n \quad (3.16)$$

Waarin  $\vec{r}$  de nieuwe positie is na de tijdstap  $\Delta t$  en  $\vec{r}_n$  de tweedimensionale verplaatsing door diffusie (zie verder).

We kunnen echter niet zomaar de snelheid uit (3.15) gebruiken om de nieuwe positie van het meta-ion te berekenen. Geladen deeltjes in een elektrisch veld volgen de veldlijnen, als we diffusie verwaarlozen. Indien de veldlijnen een kromming hebben, dan volgt een geladen deeltje ook deze kromming.

De snelheidsvector  $\vec{v}$  van een deeltje, op positie  $\vec{r}$ , is de richting van de raaklijn aan die veldlijn op positie  $\vec{r}$ . Indien we zonder meer het deeltje zouden verplaatsen naar zijn nieuwe positie door gebruik te maken van deze snelheid, volgen de meta-ionen de veldlijnen niet, maar worden ze als het ware weggeslingerd. Dit is verkeerd. Figuur 3.4(a) illustreert een voorbeeld van elektroden in hetzelfde vlak.



**Figuur 3.4: De snelheidsvector als raaklijn van een veldlijn in een IPS cel, (a) met rakende snelheid en (b) met gecorrigeerde verplaatsing. Dit schematische veldlijnenpatroon is voor de duidelijkheid sterk overdreven.**

Figuur 3.4(b) illustreert de werkwijze om de snelheid te corrigeren. We berekenen de lokale snelheid  $\vec{v}_1$  van een meta-ion, met positie  $\vec{r}_1(y_1, z_1)$ . Met deze snelheid berekenen we de positie  $\vec{r}_2$  door enkel de drift-term in rekening te brengen met een tijdstap  $\Delta t/2$  (3.17).

$$\vec{r}_2(y, z) = \vec{r}_1(y_1, z_1) + \vec{v}_1 \frac{\Delta t}{2} \quad (3.17)$$

In  $\vec{r}_2$  berekenen we opnieuw de lokale snelheid  $\vec{v}_2$ . De gecorrigeerde verplaatsing  $\vec{v}\Delta t$  is dan (3.18).

$$\vec{v}\Delta t = \vec{v}_1 \frac{\Delta t}{2} + \vec{v}_2 \frac{\Delta t}{2} \quad (3.18)$$

We kunnen gemakkelijk zien uit figuur 3.4 dat dit klopt. Door  $\vec{r}_2$  te verplaatsen volgens (3.17) naar positie  $\vec{r}_3$ . Dan zie we uit de figuur dat we rechtstreeks van  $\vec{r}_1$  naar  $\vec{r}_3$  kunnen gaan door bij  $\vec{r}_1$  een vector  $\vec{v}\Delta t$  op te tellen.

Gebruiken we nu de gecorrigeerde verplaatsing dan komen we in goede benadering opnieuw uit op de oorspronkelijke veldlijn.

### 3.4 Diffusie in 2D

Net zoals de snelheid is ook diffusie driedimensionaal in een anisotroop medium. Hoewel de diffusietensor  $\overline{\overline{D}}$  gekend is voor een willekeurige richting van de director is deze tensor niet bruikbaar voor dit Monte Carlo model.

Diffusie in het 1D wordt benaderd door de meta-ionen random te verplaatsen volgens een normale verdeling. Ik heb al in hoofdstuk 2 aangetoond dat dit een correct eindresultaat oplevert. Hoewel we hier een tweedimensionaal simulatiealgoritme bespreken is de oplossing eenvoudiger als we de meta-ionen laten diffunderen in 3D en het resultaat projecteren op het  $YZ$ -vlak.

De eenvoudigste oplossing is het meta-ionen te verplaatsen in het assenstelsel gekoppeld aan de director. En dan de verplaatsing transformeren naar het assenstelsel van de vloeibaar-kristalcel.

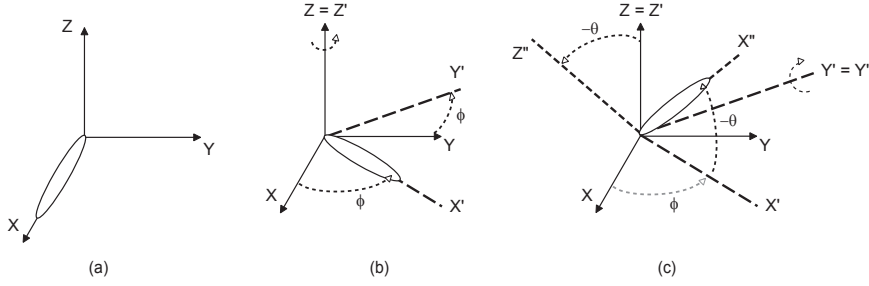
### 3.4.1 De Transformatiematrix

Ik maak hiervoor gebruik van de Euler transformatiehoeken [44]. En onderstel de directorrichting volgens de  $X$ -as in het assenstelsel verbonden aan de moleculen.

We stellen eerst de transformatiematrix op van het assenstelsel verbonden aan de cel naar dat verbonden aan de moleculen.

De verschillende stappen zijn geïllustreerd in figuur 3.5. De uitgangspositie is het  $XYZ$ -stelsel waarin de director volgens de  $X$ -as ligt (figuur 3.5(a)). De rotaties zijn:

- (1) De  $X'Y'Z'$ -assen worden geroteerd om de  $Z$ -as over een hoek  $\varphi$  in wijzerzin relatief ten opzichte van  $XYZ$ . (de assen  $Z$  en  $Z'$  vallen samen)
- (2) De  $X''Y''Z''$ -assen worden geroteerd om de  $Y'$ -as over een hoek  $-\theta$  in wijzerzin relatief ten opzichte van  $X'Y'Z'$ . (de assen  $Y'$  en  $Y''$  vallen samen)



**Figuur 3.5:** (a) director ligt volgens  $X$ -as, (b) rotatie over de hoek  $\varphi$  rond de  $Z$ -as, (c) rotatie over de hoek  $-\theta$  om de  $Y'$ -as.

De twee matrices die deze rotaties beschrijven zijn:

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

$$R_y(-\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

De transformatiematrix is gegeven door het product van de voorgaande matrices.

$$A(\varphi, -\theta) = R_y(-\theta) R_z(\varphi) \quad (3.21)$$

$$A(\varphi, -\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \varphi & \sin \theta \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ -\sin \theta \cos \varphi & -\sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

De matrix  $A(\varphi, -\theta)$  is de transformatiematrix om van het assenstelsel verbonden aan de cel naar dat verbonden aan de moleculen te gaan.

Voor diffusie in het molecuulstelsel hebben we echter de omgekeerde rotaties nodig. De transformatiematrix  $B$  is makkelijk opgesteld.

$$B(\theta, -\varphi) = R_z(-\varphi) R_y(\theta) \quad (3.23)$$

Vervangen we in (3.19)  $\varphi$  door  $-\varphi$  en  $-\theta$  door  $\theta$  in (3.20), dan vinden we.

$$B(\theta, -\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \theta & -\sin \varphi & -\cos \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi \cos \theta & \cos \varphi & \sin \varphi \sin \theta \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Hiermee hebben we de transformatiematrix  $B$  gevonden om coördinaten van het directorstelsel naar het celstelsel te transformeren. Op voorwaarde dat de director volgens de X-as verondersteld wordt.

### 3.4.2 Driedimensionale diffusie

De geladen deeltjes zullen gemakkelijker bewegen evenwijdig met de directorrichting dan er loodrecht op. We kunnen dus gebruik maken van twee diffusieconstanten,  $D_{//}$  en  $D_{\perp}$ , de respectievelijke diffusieconstanten parallel met en loodrecht op de directorrichting.

In het directorcoördinatenstelsel gebruiken we drie maal de estimatorfunctie met normale verdeling voor de hoofdassen met als standaard deviaties respectievelijk:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \sqrt{2D_{//} \cdot \Delta t} \\ \sigma_y &= \sigma_z = \sqrt{2D_{\perp} \cdot \Delta t} \end{aligned} \quad (3.25)$$

Zo bekomen we een randomverplaatsing in 3D in het directorcoördinatenstelsel. Doen we dit voor voldoende meta-ionen dan bekomen we een sigaarvormige Gaussverdeling omdat de diffusieconstante volgens de lange as van de moleculen groter is dan deze in de richtingen er loodrecht op.

Met behulp van de transformatiematrix  $B$  (3.24) verkrijgen we dan de bijdrage  $\vec{r}_n$ , de verplaatsing voor diffusie (waarin we de x-richting niet gebruiken).

### 3.4.3 Diffusie vanaf de wand

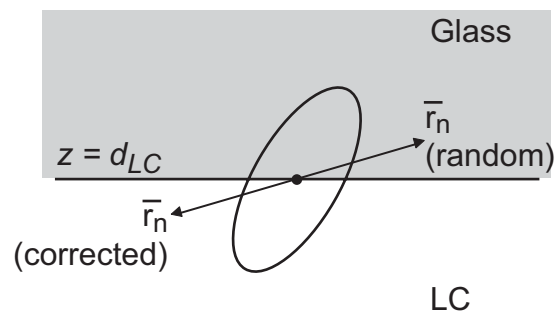
Zoals eerder al aangebracht werken we terug met het selectiealgoritme voor de drie verschillende algoritmes als we in de nabijheid van een wand zitten. Bij diffusie vanaf de wand moeten we echter ook rekening houden met de anisotropie in 2D. We kunnen hierdoor de verdubbelde diffusie niet analytisch bepalen.

Dit is opgelost als we het voorgaande diffusiealgoritme gebruiken samen met een eventuele puntspiegeling.

Het 2D-diffusiealgoritme levert een 2D-vector  $\vec{r}_n$  op die de randomverplaatsing is als gevolg van diffusie. Bij het “diffusie nabij de wand”-algoritme vertrekken we systematisch vanaf een punt op de wand. Dit wil zeggen dat de wand, in de Z-richting, telkens door de oorsprong gaat van de vector  $\vec{r}_n$ . Figuur 3.6 toont deze situatie voor een wand op  $z = d_{LC}$ . De ellips stelt de contourlijn voor van gelijke probabieliteit voor de diffusievector  $\vec{r}_n$ , de ellipsvorm is het gevolg van de anisotropie. Door de aanwezigheid van de wand is een verplaatsing enkel toegelaten in

het vloeibaar-kristalmateriaal, dat in figuur 3.6 lager ligt dan  $d_{LC}$ . Indien de diffusievector  $\vec{r}_n$  buiten het vloeibaar-kristalmateriaal wijst, voeren we een puntspiegeling om de oorsprong uit. Hierdoor bekomen we een verdubbelde probabiteit uit voor het vloeibaar-kristalmateriaal

Analoog voor een wand op  $z = 0$ .



Figuur 3.6: Puntspiegeling als correcte voor diffusie vanaf de wand .

### 3.5 Het exponentiële regime

Het laatste algoritme, wanneer de meta-ionen zich verdelen volgens een exponentiële verdeling aan de wand, is ook in deze tweedimensionale benadering correct. In deze bespreking van dit algoritme bespreken we de invloed van dit algoritme loodrecht op de wand en evenwijdig met de wand apart.

### 3.5.1 Loodrecht op de wand

De exponentiële verdeling van de meta-ionen tegen de wand door het dynamische evenwicht tussen drift en diffusie wordt in dit model enkel in de richting loodrecht op de wand (de  $Z$ -richting) berekend.

De steilheid van de exponentiële functie (2.6), loodrecht op de wand, wordt bepaald door de verhouding  $D_{zz}/v_z$ . Hier wordt de diffusieconstante in de  $Z$ -richting enkel bepaald door de tilthoek  $\theta$ . We gebruiken dus de  $zz$ -component van de diffusietensor .

$$D_{zz} = D_{//} \sin^2 \theta + D_{\perp} \cos^2 \theta \quad (3.26)$$

De  $z$ -component van de snelheid  $v_z$  wordt gegeven door (3.15), waarin naast de  $z$ -component van het elektrische veld  $E_z$  ook de invloed van de laterale component  $E_y$  in rekening wordt gebracht. Dit garandeert een correcte exponentiële verdeling in de  $Z$ -richting.

### 3.5.2 Evenwijdig met de wand

Voor geladen deeltjes in de exponentiële evenwichtsverdeling is lateraal transport onmogelijk. Lateraal ionentransport bestaat wel in één dimensionale structuren, maar is het gevolg van asymmetrische aanstuurspanningen. De ionen kunnen bewegen volgens de richting die de bissectrice is van de rub-richtingen aan de beide aligneringslagen [34, 35]. Lateraal ionentransport is het onderzoeksonderwerp van Goran Stojmenovik.

Zonder aanpassing in het tweedimensionaal Monte Carlo model zou het mogelijk zijn om in één dimensionale structuren toch lateraal transport te verkrijgen wanneer de deeltjes in de exponentiële evenwichtsverdeling zitten.



In ééndimensionale structuren is er geen laterale component van het elektrische veld ( $E_y = 0$ ). Toch kan de snelheid van de geladen deeltjes een laterale component bezitten (3.15). Dit is een gevolg van de anisotropie van het medium en in de bulk levert dit geen enkel probleem op. In de nabijheid van een wand komen we in de volgende situatie bij een ééndimensionale structuur: Meta-ionen worden verdeeld in een exponentiële distributie volgens de  $Z$ -richting en bewegen lateraal, langs de wand, met een snelheid  $v_y$  als gevolg van de anisotropie.

Omdat de randvoorwaarden aan het einde van de rekenstructuur in de  $Y$ -richting als periodiek werden gekozen, levert dit macroscopisch geen verschil op met de resultaten van het ééndimensionale algoritme. In dit model verdelen de meta-ionen zich in een exponentiële distributie aan de wand. Deze distributie schuift langzaam op door de laterale component van de snelheid  $v_y$  en wegens de periodiek randvoorwaarden kan deze beweging oneindig lang doorgaan zonder voor problemen te zorgen.

Deze situatie is echter onfysisch, want ze volgt niet uit de continuümtheorie.

Om het model in overeenstemming te brengen met de theorie, moet er hier een kleine correctie geïmplementeerd worden.

Eenmaal het meta-ion in de  $Z$ -richting in verdeeld wordt volgens het exponentiële regime, houden we bij het berekenen van de laterale snelheid  $v_y$  geen rekening met de  $z$ -component van het elektrische veld. De snelheid  $v_y$  wordt dan niet meer berekend met (3.15), maar met formule (3.27).

$$v_y = \mu_{yy} E_y \quad (3.27)$$

Hierdoor zal, ten eerste, bij de simulatie van een ééndimensionale structuur de opschuiving van de exponentiële verdeling niet optreden ( $E_y = 0$ ). Ten tweede blijft de mogelijkheid bestaan dat, indien de laterale component van het elektrische veld bestaat ( $E_y \neq 0$ ), de meta-ionen toch lateraal kunnen bewegen in hun exponentiële verdeling.

Goran Stojmenovik zal in zijn onderzoek naar laterale ionenbeweging deze benadering verder onderzoeken.

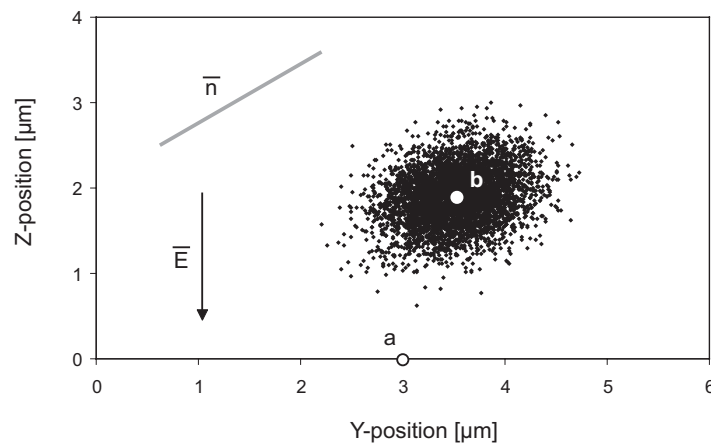
### 3.6 De nauwkeurigheid

#### 3.6.1 Diffusiealgoritme

Om de werking van dit algoritme te testen vertrekken we van een  $\delta$ -distributie van eenwaardig positieve ionen ( $Z = +1$ ) bij de wand ( $z = 0$ ) (positie (a) op figuur 3.7). Het elektrische veld veronderstellen constant en de director heeft een constante oriëntatie. De simulatie parameters staan in tabel 3-1.

<i>Elektrisch veld <math>E</math></i>	$10^6 \text{ V/m}$
<i>Dikte LC (<math>d_{lc}</math>)</i>	$4 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Breedte structuur</i>	$6 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Twisthoek <math>\varphi</math></i>	$90^\circ$
<i>Tilthoek <math>\theta</math></i>	$30^\circ$
<i>Mobiliteit <math>\mu_{\perp}</math></i>	$5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{Vs}$
<i>verhouding <math>\mu_{\parallel}/\mu_{\perp}</math></i>	$1.8$

Tabel 3-1: De parameterwaarden verplaatsing  $\delta$ -distributie in anisotroop medium met constant veld.



**Figuur 3.7: Distributie van 6000 negatieve meta-ionen na simulatie van het transport in een anisotroop, homogeen medium.**

Positie (b) in figuur 3.7 is de gemiddelde positie van alle meta-ionen, deze is verplaatst van de startpositie door drift in een anisotroop medium. Hoewel het veld enkel een  $z$ -component bezit heeft de snelheid een laterale component. Deze test toont ook duidelijk de invloed van de anisotropie van de vloeibaar-kristalmoleculen.

De elliptische spreiding rond (b) is het gevolg van normaal verdeelde diffusie, onder invloed van de anisotropie en de directoriëntatie van het vloeibaar-kristalmateriaal. De resultaten komen overeen met onze verwachtingen van een tweedimensionaal algoritme voor ionentransport in vloeibaar-kristalcellen.

### 3.6.2 Het elektrische veld

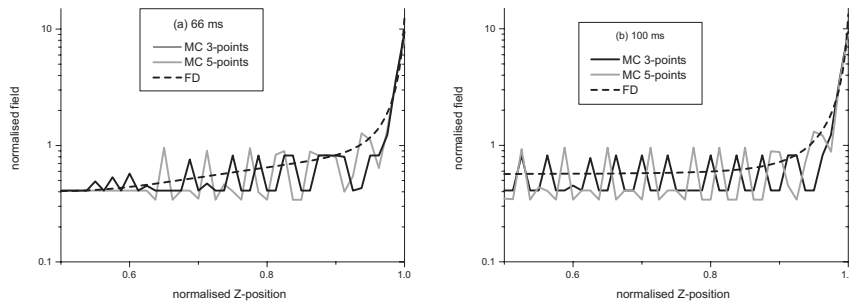
De invloed van de ladingsverdeling op het lokale elektrische veld is de belangrijkste interactie. Maar omgekeerd kan ook een foutief berekend elektrisch veld aanleiding geven tot een verkeerde

ladingsverdeling. De invloed van de verdeling op het veld en omgekeerd wordt, net zoals in het eendimensionale geval, bij elke tijdstap berekend.

Om de veldberekening te testen, simuleren we een eendimensionale twistloze cel. Zo kunnen we de resultaten vergelijken met het eendimensionale FD-algoritme. We vergelijken de veldverdeling en concentratieverdeling voor de positieve ionen. De aangelegde spanning ligt onder de drempelspanning. Alle simulatieparameters zijn te vinden in tabel 3-2.

<i>spanning <math>V</math></i>	<i>1 V</i>
<i>Dikte LC(<math>d_{lc}</math>)</i>	<i><math>4 \times 10^{-6} \text{ m}</math></i>
<i>Breedte LC</i>	<i><math>4 \times 10^{-6} \text{ m}</math></i>
<i>Dikte AL (<math>d_{al}</math>)</i>	<i><math>50 \times 10^{-9} \text{ m}</math></i>
$\epsilon_{LC}$	3
$\epsilon_{AL}$	2
$N^{\pm}$	$8.9 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$
$\mu^{\pm}$	$6.2 \times 10^{-10} \text{ m}^2/Vs$
<i>Aantal intervallen</i>	<i>80</i>
<i>Aantal Meta-ionen</i>	<i>50000</i>

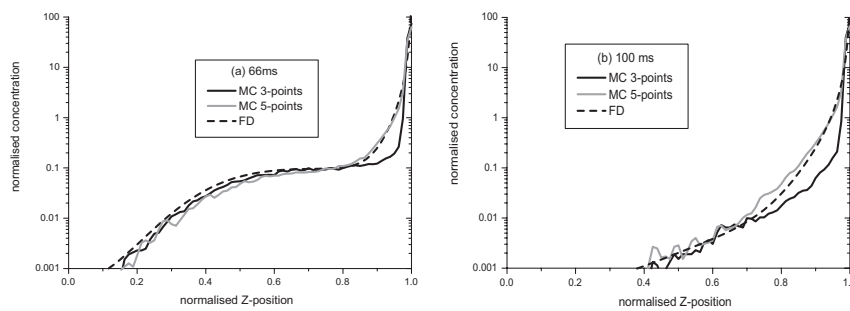
**Tabel 3-2: De parameter waarden om de nauwkeurigheid van het elektrische veld te testen.**



**Figuur 3.8: Vergelijking tussen de genormaliseerde veldverdelingen van MC met 3-punts afgeleide, MC met 5-punts afgeleiden en FD, in de 2<sup>e</sup> helft van de cel, voor (a) 66 ms en (b) 100 ms.**

De resultaten van deze simulatie werden herleid naar 1D om vergelijking met het FD-algoritme mogelijk te maken. Figuur 3.8 toont de genormaliseerde veldverdeling na 66 ms (a) en na 100 ms (b). Voor de twee Monte Carlo algoritmes is er ruis in de veldverdeling. Bij het algoritme met de vijfpuntsafgeleide sluit het elektrische veld iets beter aan bij het correcte resultaat van de eindige elementen methode.

De oorzaak hiervan ligt aan ruis op de concentratieverdeling. De concentratieverdeling beïnvloedt via haar lading de potentiaalverdeling. De potentiaalverdeling is daardoor geen glad oppervlak. Bij het afleiden van het potentiaaloppervlak wordt een kleine fout versterkt.



**Figuur 3.9: Vergelijking tussen de genormaliseerde concentratieverdeling van MC met 3punts afgeleide, 5-punts afgeleide en FD, voor (a) 66 ms en (b) 100 ms.**

Deze kleine verbetering in het elektrische veld is voldoende om vanaf de eerste iteratie een correcte concentratieverdeling te bekomen en geen propagatie van fout te hebben in het algoritme. Figuur 3.9 toont het effect van de verbeterde veldberekening. De concentratieverdeling voor het MC algoritme met de vijfpuntsafgeleide sluit, voor beide tijden, nauw aan bij de correcte verdeling van het FD-algoritme.

Deze test toont ook aan dat de invoering van de 2<sup>e</sup> dimensie geen invloed heeft op de simulatieresultaten van een eendimensionale cel.

### 3.7 De geïnduceerde stroom

Nu we voldoende vertrouwen hebben in dit tweedimensionaal simulatie programma moeten we nog de stroom berekenen. De stroom is een belangrijk instrument om de metingen met de simulaties te kunnen koppelen.

In dit tweedimensionaal simulatieprogramma moeten we de stroom berekenen aan de hand van Ramo's theorema [45].

Onderstel een capacitieve structuur met op elektrode 1 een spanning  $V_1$ , elektrode 2 staat op  $0 V$  (figuur 3.10). Een deeltje met lading  $Q'$  induceert dan op elektrode 1 een tegenlading  $-Q_1$  volgens (3.28).

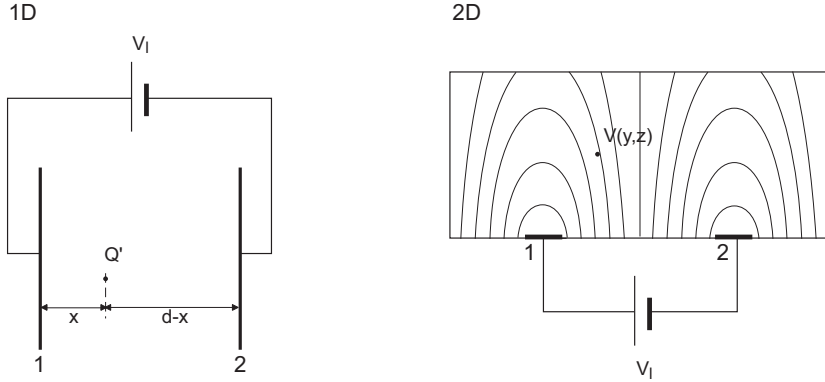
$$Q_1 = -\frac{V(x)}{V_1} Q' \quad (3.28)$$

In 1D hebben we een capaciteit met dikte  $d$ , de lokale potentiaal op positie  $x$ ,  $V(x)$ , is dan een simpele functie gegeven door (3.29).

$$V(x) = -\frac{x-d}{d} V_1 \quad (3.29)$$

Verplaatst het geladen deeltje zich met een snelheid  $v = \frac{dx}{dt}$  in de 1D capaciteit dan vinden we de externe lekstroom  $I_{lek}$  terug door Ramo's theorema [30] [45].

$$I_{lek} = \frac{dQ_1}{dt} = +\frac{v}{d}Q' \quad (3.30)$$



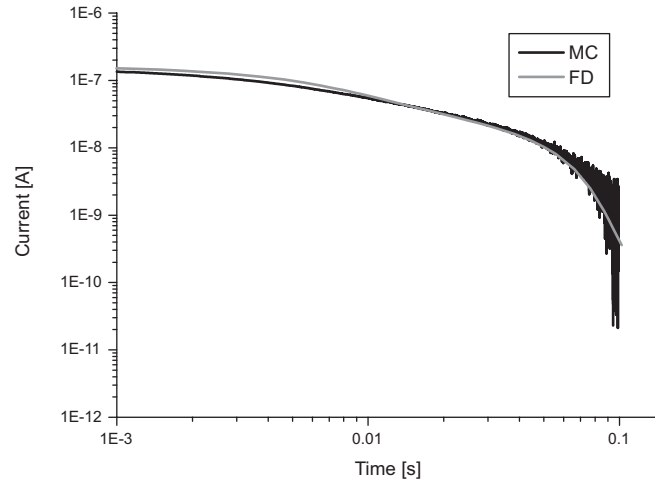
**Figuur 3.10: Capacitieve structuur met lading  $Q'$ . (a) 1D situatie, (b) 2D voorbeeld (de veldlijnen zijn illustratief)**

In de 2D situatie, met twee elektrodes, is de actuele lokale potentiaal  $V(y, z)$  niet meer gegeven door een simpele formule, maar blijft (3.28) wel geldig. Alle meta-ionen, van de verschillende ionsoorten, induceren elke een lading  $Q_1$  op elektrode 1.

De externe lekstroom berekenen we in 2D als volgt. We tellen alle geïnduceerde ladingen  $Q_1$  op, zodat we de totale geïnduceerde lading  $Q_1^{totaal}$  op elektrode 1 bekomen na elke tijdstap. De stroom vinden we door deze lading af te leiden naar de tijd (3.31).

$$I(t) = \frac{dQ_1^{totaal}}{dt} \quad (3.31)$$

Als voorbeeld berekenen we de stroom voor een systeem met de simulatieparameters van tabel 3-2. Figuur 3.11 toont de vergelijking van het resultaat voor de eerste 100 ms tussen het 2D MC algoritme en het 1D FD algoritme. De resultaten zijn in overeenstemming met elkaar.



**Figuur 3.11: vergelijking stroomberekening van het 2D Monte Carlo Algoritme met het 1D FD algoritme.**

### 3.8 Toepassing: De In-Plane-Switching cel

De belangrijkste toepassing, voor vloeibaar-kristalbeeldschermen, is het zogenaamde “In-Plane-Switching”-beeldscherm (IPS). De naam verklapt het al. De moleculen starten van een uniforme twistloze verdeling en draaien azimuthaal (twisten) in een vlak evenwijdig met de glasplaten bij het aanleggen van een spanning, in plaats van te tilten naar een oriëntatie loodrecht op de glasplaten.

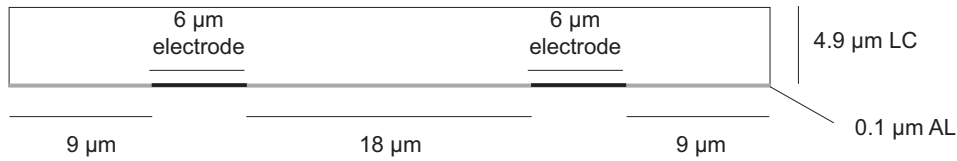


Om de azimuthale twist (In Plane Switching) te bewerkstelligen liggen de elektrodes naast elkaar op dezelfde glasplaat. Dit veroorzaakt een elektrisch veld in de horizontale richting. Dit type vloeibaar-kristalbeeldscherm is dus tweedimensionaal.

Figuur 3.12 toont het schema van de IPS-structuur in het YZ-vlak die we zullen gebruiken voor de simulaties. De elektrodes zijn 6  $\mu\text{m}$  breed, de afstand tussen 2 elektrodes is 18  $\mu\text{m}$ , de LC laag is 4.9  $\mu\text{m}$  dik en de aligneringslaag is 100 nm dik. De X-richting is loodrecht op het vlak van het blad en wijst naar de kijker toe. De initiële tilt en twisthoeken worden tegenover de X-richting gedefinieerd. Alle overige simulatieparameters zijn te vinden in tabel 3-3.

$K_1=K_2=K_3$	12.6 pN
$\gamma$ (rot. visc.)	123 mPa.s
$\Delta\epsilon$	16.4
$\epsilon_{\perp}$	5.8
$\theta_{init}$	2°
$\phi_{init}$	10°
$\epsilon_{AL}$	3.5
$\mu^+_{\perp}$	$5 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$
$\mu^-_{\perp}$	$1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$
$\mu_{\parallel}/\mu_{\perp}$	1.8
$Z^{\pm}$	1
Aantal Meta-ionen	100.000
$T$	300 K
$V_{applied}$	10V

Tabel 3-3: De parameter waarden van de IPS-simulatie.

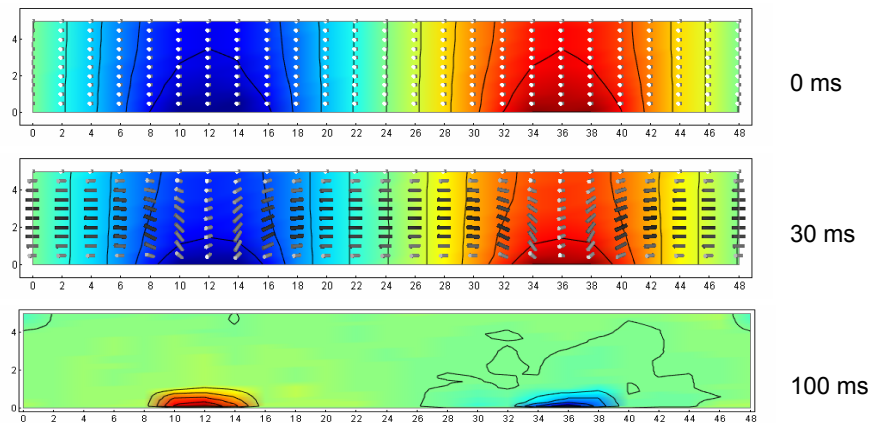


**Figuur 3.12: Schema IPS-structuur.**

We vergelijken de resultaten van een simulatie met een lage ionenconcentratie met die van een simulatie met een hoge ionenconcentratie, alle andere parameters zijn terug te vinden in tabel 3-3.

Bij een voldoende lage concentratie van de ionen, is er geen verstoring op het elektrische veld. Dit is het geval van een ideale IPS-cel. Om dit te simuleren gebruiken we twee éénwaardige ionen van een tegengestelde polariteit, om de ladingsneutraliteit te waarborgen, elk met een concentratie van  $10^{17} \text{ m}^{-3}$ . De resultaten van deze simulatie voor verschillende tijden vinden we terug in figuur 3.13. De kleuren op de achtergrond stellen de potentiaalverdeling voor, gaande van blauw (0 V, links) tot rood (10 V, rechts). De directororiëntatie is voorgesteld door cilinders.

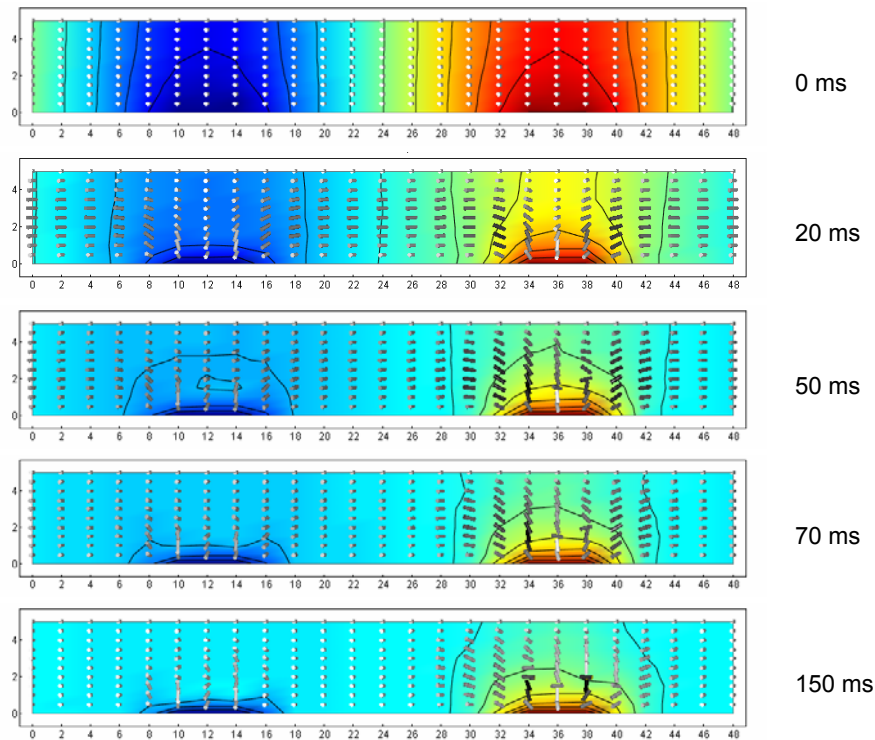
De bovenste verdeling van figuur 3.13 toont de potentiaalverdeling en de uniforme directororiëntatie in de beginsituatie ( $t = 0$ ), hierin zijn beide ionsoorten homogeen verdeeld over de tweedimensionale structuur. Leggen we een spanning van 10 V aan over de elektroden, dan bereikt de directororiëntatie na 30 ms haar eindverdeling. Dit zien we in het middelste overzicht van figuur 3.13, de directors tussen de elektroden zijn gedraaid in het vlak evenwijdig met het horizontale elektrische veld. Na 100 ms bereikt ook de ionenverdeling zijn eindtoestand. Dit kunnen we zien op de onderste verdeling van figuur 3.13. De gebruikte ionenconcentratie is te laag om het veld te beïnvloeden.



**Figuur 3.13: Simulatieresultaten voor de IPS-structuur met lage ion concentratie. De twee bovenste figuren tonen de potentiaalverdeling bij het aanleggen van 10 V (blauw 0 V, rood 10 V) en de directororiëntatie na 0 ms en 30 ms. Onderaan de ionendistributie na 100 ms.**

Verhogen we de ionenconcentratie naar  $10^{20} \text{ m}^{-3}$  dan krijgen we een significante beïnvloeding van de ionenbeweging op het elektrische veld. Dit kunnen we zien in de tijdsequentie voorgesteld in figuur 3.14

De beginsituatie is analoog als hierboven. Bij het aanleggen van de spanning zullen de moleculen draaien zodat ze evenwijdig met het elektrische veld komen. Deze situatie wordt het dichtst benaderd op 20 ms. De ionen bewegen naar de elektrode met tegengestelde polariteit, door de hoge concentraties aan de ionen beïnvloeden ze de veldverdeling waardoor het interne elektrische veld langzaam gecompenseerd wordt. Het directe gevolg hiervan is dat de moleculen een zwakker elektrisch veld voelen en terug zullen draaien naar hun oorspronkelijke toestand. Dit is duidelijk te zien in de sequentie 20 ms  $\rightarrow$  50 ms  $\rightarrow$  70 ms. Na 150 ms zijn de moleculen tussen de elektrodes teruggekeerd naar hun oorspronkelijke oriëntatie.



**Figuur 3.14:** Tijdsequentie van simulatieresultaten voor de IPS-structuur met hoge ion concentratie. De kleuren op de achtergrond zijn de potentiaalverdeling (blauw is 0 V, rood is 10 V), De cilinders stellen de directororiëntatie voor.

Een tweede interessant fenomeen dat hier in deze simulatiesequentie naar voren komt is de asymmetrische veldverdeling tussen beide elektroden. Vooral bij latere tijdstippen is dit meer uitgesproken (in de sequentie beter zichtbaar vanaf 50 ms). Deze asymmetrische veldverdeling is het gevolg van een asymmetrische veldcompensatie. Dit vloeit natuurlijk voort uit de mobiliteitsverschillen tussen de positieve en negatieve ionen.

In deze simulatie zijn de positieve ionen het snelst, ze verzamelen zich aan de negatieve elektrode (rechts in de figuur). Ze zullen dus, gemiddeld gezien, eerder de negatieve elektrode

bereiken en er een hoge concentratie opbouwen. Dit resulteert in een situatie waarin een grote groep negatieve ionen de positieve elektrode nog niet bereikt heeft terwijl zowat alle positieve ionen de negatieve elektrode bereiken. Hierdoor is er een asymmetrische ladingsverdeling aan beide elektroden en dus een asymmetrische veldverdeling. Deze situatie is niet stabiel, langzaam zal de directororiëntatie terug symmetrisch worden.

Wat echter belangrijk is aan deze situatie is de reactie van de moleculen op de asymmetrische veldverdeling. Want dit kan optisch gecontroleerd worden.

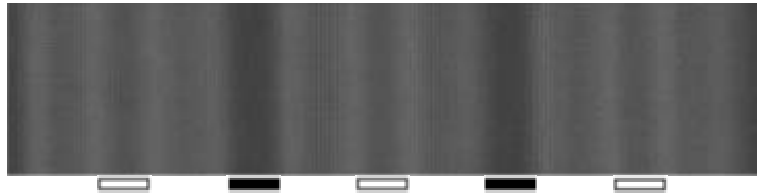
We bekijken de IPS-structuur tussen gekruiste polarisatoren, zonder de interne twist hebben we een normally-black-modus. Wanneer de moleculen draaien in het vlak evenwijdig aan de glasplaten wordt de polarisatie gewijzigd, zodat er meer licht door de analysator zal komen. Boven de elektroden draaien de moleculen verticaal, waardoor er geen polarisatiewijziging optreedt en er absorptie optreedt aan de analysator. Bij een normale IPS werking, met een verwaarloosbaar aantal ionen, zullen we optisch donkere lijnen kunnen zien boven de elektroden, als de moleculen tussen de elektroden gedraaid zijn en daar een heldere transmissie geven. Deze situatie is duidelijk af te leiden uit de resultaten in figuur 3.13 bij een lage ionenconcentratie.

Bij een hoge concentratie krijgen we eerst de evolutie naar een heldere toestand met lijnen boven de elektrodes. Wanneer de compensatie belangrijk begint te worden draaien de moleculen terug naar hun oorspronkelijke toestand, optisch gezien krijgen we terug een donkere toestand.

Door de asymmetrische veldcompensatie gebeurt het terugdraaien ook asymmetrisch boven de elektrodes. In figuur 3.14 zien we dat na 70 ms de moleculen boven de negatieve elektrode terug in hun

originele toestand zijn. Terwijl boven de positieve elektrode de moleculen nog steeds verticaal zijn, maar er vlak naast noch steeds horizontaal in het vlak gedraaid zijn. Op dat tijdstip zien we optisch, door de gekruiste polarisatoren, een helder streepje aan beide randen van de positieve elektrode en een volledige donkere toestand boven de negatieve elektrode.

Bij het aanleggen van een spanning weten we welke elektrode positief en welke negatief wordt. We kunnen een schatting maken voor de mobiliteiten van de ionsoorten. Wat we echter niet kunnen weten is welke ionsoort sneller is dan de andere. Dankzij deze asymmetrische veldcompensatie hebben we nu een hulpmiddel om dat te bepalen. De bovenstaande bespreking gaat op als de positieve ionen sneller zijn, blijkt dit onjuist dan zal hetzelfde fenomeen waargenomen worden aan de negatieve elektrode.



**Figuur 3.15: Optisch transmissie van de IPS-structuur, gezien door gekruiste polarisatoren, na 150 ms.**

Deze methode werd optisch bevestigd door Filip Beunis. Het resultaat is de foto in figuur 3.14, dit is een bovenaanzicht van de IPS-structuur na 150 ms gezien door gekruiste polarisatoren. De rechthoeken onderaan stellen de positie en breedte van de elektroden voor, wit is negatieve elektrode (0V), zwart de positieve (+10 V). De snelste ionsoort blijkt de negatieve te zijn.

Een gedetailleerde optische werking van de IPS structuur valt buiten dit proefschrift, voor meer informatie hierover verwijs ik naar het onderzoek van Chris Desimpel.

### **3.9 Besluit**

Het is duidelijk dat het tweedimensionale Monte Carlo Algoritme, zoals beschreven in dit hoofdstuk, het ionentransport in twee dimensies correct kan berekenen.

Het grote voordeel van dit algoritme is de simpele extensie van één dimensie naar twee of meer. Bij een algoritme gebaseerd op eindige differenties wordt het ionentransport geven door een stel gekoppelde partiële differentiaal vergelijkingen. Dit zou aanleiding geven tot een exponentiële toename van het aantal berekeningen door het aantal dimensies. Terwijl de extensie van het Monte Carlo algoritme slechts aanleiding geeft tot een lineaire toename van het aantal berekeningen. Daar bovenop is de stabiliteit en de correctheid onafhankelijk van de tijdstap, zodat deze tweedimensionale versie van dit Monte Carlo algoritme vlot op een hedendaagse pc kan draaien.

Zoals de laatste paragraaf aantoont kan de extensie naar een tweede dimensie extra informatie opleveren over de ionen.





## Hoofdstuk 4

# Monte Carlo ionentransport op een onregelmatige mesh (3D)

Het tweedimensionale Monte Carlo algoritme uit het vorige hoofdstuk heeft één grote beperking. Het ionentransport kan enkel berekend worden in een rechthoekige vloeibare kristallaag. Voor de meeste toepassingen is dit voldoende, maar willen we de invloed van geometrische objecten in de LC-laag wil onderzoeken dan is er nood aan een nieuw algoritme.

Ik stel hier een nieuw algoritme voor om ionentransport te simuleren in een driedimensionale structuur. In dit algoritme wordt de ruimte verdeeld in een onregelmatige mesh of rooster. De ionen zijn steeds toegewezen aan de roosterpunten en kunnen door drift en diffusie overspringen naar een naburig roosterpunt. De implementatie maakt weer gebruik van Monte-Carlo algoritmes.

Dit werk is een onderdeel van het MonLCD EU-project G5RD-CT-2000-00115. Alle berekeningen zal ik uitleggen in 3D. De

bijhorende illustraties zullen soms tweedimensionaal zijn. De voornaamste reden hiervoor is de duidelijkheid van een tweedimensional tekening.

## **4.1 Het 3D LC-model.**

Net zoals bij het tweedimensionale algoritme is dit 3D ionentransport algoritme een module die past in een volledig 3D LC-model.

Om de 3D geometrie te definiëren en de materialen toe te kennen aan de elementen in de rekenstructuur werd opnieuw het GiD pakket gebruikt.

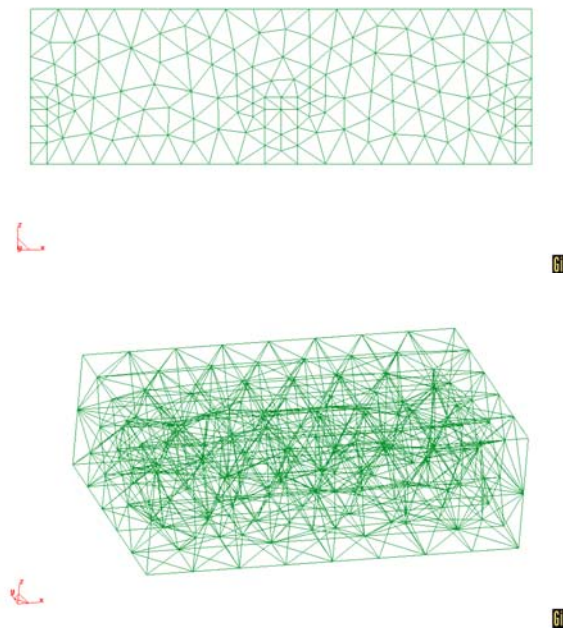
Het LC-simulatieprogramma, om de directorbeweging en de potentiaalverdeling in drie dimensies uit te rekenen, werd opnieuw ontwikkeld door de Optical Systems and Devices Group van University College London (UCL) [46].

Het resultaat is een directorprofiel en een potentiaalverdeling in drie dimensies. Maar de positie van de punten waarop deze gegevens berekend worden zijn niet meer equidistant. Deze punten vormen een onregelmatige mesh.

### **4.1.1 Een onregelmatige mesh.**

Als coördinatenstelsel gebruiken we de definitie gegeven in paragraaf 3.1. De meeste driedimensionale (3D) simulatie pakketen maken gebruik van de eindige elementen methode (Finite Elements:

FE). Een 3D rekenstructuur (volume) wordt dan opgevuld met tetraëders, een 2D structuur (grensvlak) met driehoeken. Dit zijn de elementen. De hoekpunten van deze 2D en 3D elementen zijn, in het algemeen, niet equidistant gespatieerd van elkaar. Een dergelijke opvulling van de rekenruimte noemen we een “onregelmatige mesh”. Figuur 4.1 toont een 2D en een 3D voorbeeld.



**Figuur 4.1: Het opvullen van een rekenstructuur met elementen (boven) in 2D en (onder) in 3D.**

Deze mesh wordt gegenereerd door de ingebouwde mesh-generator in het GiD pakket. Het resultaat is een ASCII-bestand met daarin alle informatie over de mesh. Figuur 4.2 toont de opbouw van het bestand. Allereerst worden alle coördinaten van de gegenereerde datapunten weergegeven. Daarna volgt de lijst met volume elementen. Elke tetraëder wordt gedefinieerd door vier punten en

een materiaalnummer. Het materiaalnummer wordt gebruikt om de eigenschappen van de elementen en de datapunten waaruit het element opgebouwd is te definiëren. Na de volume-elementen volgen de oppervlakte-elementen gegeven door drie punten en een materiaaltype.

Mesh output:				
Coordinaten lijst:		x	y	z
		...		
		...		
Volume elementen:	punt1, punt2, punt3, punt4,	materiaal_type		
		...		
		...		
Oppervlakte elementen:	punt1, punt2, punt3,	materiaal_type		
		...		
		...		

**Figuur 4.2: Mesh informatie in ASCII-bestand.**

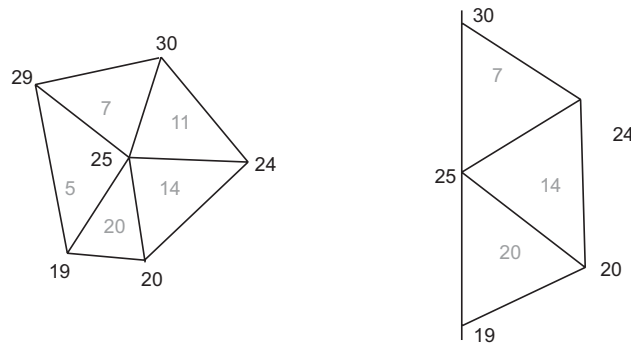
De punten krijgen dus een materiaaltype toegekend afhankelijk van de elementen waartoe de punten behoren. Het is perfect mogelijk dat punten zowel een materiaaltype krijgen door het volume element als door het oppervlakte element. In dat geval krijgt het materiaaltype van het oppervlak in dit algoritme de voorrang. Dit valt trouwens gemakkelijk te begrijpen, een elektrode bijvoorbeeld is een oppervlak en is belangrijk voor het aanleggen van een spanning. Ook punten gelegen op de grensvlakken tussen het vloeibare kristal en een diëlektricum krijgen een apart materiaaltype. De invloed van de materiaaltypes op het ionentransport wordt verder besproken.

Dit mesh-bestand bevat veel meer informatie dan we op het eerste gezicht denken. Per datapunt kunnen we een lijst opstellen met de volume-elementen die het datapunt als hoekpunt gebruiken. We

doorlopen hiervoor alle volume-elementen en schrijven bij de datapunten, waaruit de tetraëder opgebouwd is, het nummer van het volume-element.

Indien een datapunt  $i$  in een element  $k$  zit, dan zijn de andere datapunten  $j \neq i$  ( $j = 1, \dots, 4$ ) van dit element  $k$ , de eerste naburen van het punt  $i$ . Doen we dit voor alle elementen  $k$  die datapunt  $i$  bezitten, dan bekomen we een lijst met eerste naburen van het datapunt  $i$ .

Figuur 4.3 illustreert de elementen (grijze nummering) en de naburen (zwarte nummering) voor een punt  $\vec{r}_0$  ( $i = 25$ ) in de bulk (a) of aan een grens (b).



**Figuur 4.3: De elementen en de eerste naburen van een punt in 2D, (a) volledig omringd in de bulk, (b) voor een punt aan een grens.**

Deze informatie zal verder gebruikt worden in de verschillende onderdelen van het Monte Carlo algoritme voor ionentransport op een onregelmatige mesh.

## 4.2 Het elektrische veld.

Opnieuw moeten we het elektrische veld berekenen in de datapunten. Dit elektrische veld is noodzakelijk om de snelheid  $\vec{v}$  te kunnen bepalen. Ditmaal zijn de punten niet equidistant verdeeld in drie orthogonale richtingen. We moeten dit probleem dus anders aanpakken.

Laat ons eerst kijken hoe de datapunten verspreid liggen ten opzichte van elkaar. Figuur 4.3 schetst de situatie voor 2D. We zien de eerste naburen van het punt  $\vec{r}_0$  en de elementen waartoe  $\vec{r}_0$  behoort. In deze illustratie zijn er 5 elementen met 5 naburen voor een punt met een volledige omringing (a) en 3 elementen met 4 naburen voor een punt aan de grens (b). Dit zijn geen vaste waarden en in 3D loopt dit aantal gemakkelijk op tot ongeveer 20 naburen voor een punt in de bulk. De afstand tussen de datapunten is variabel, alsook de richting.

We kennen de eerste naburen van  $\vec{r}_0$  en van deze naburen  $i$  kennen we de positie  $\vec{r}_i$  en de potentiaal  $U_i$ . We kunnen dus een hypervlak (4.1) voor de potentiaal fitten door deze punten.

$$ax + by + cz + d = U \quad (4.1)$$

We doen dit door de kleinste kwadraten methode. Hiervoor minimaliseren we (4.2).

$$\sum_i (ax_i + by_i + cz_i + d - U_i)^2 = \Delta \quad (4.2)$$

We sommeren over alle naburen  $\vec{r}_i$  van het punt  $\vec{r}_0$ , met  $\vec{r}_0$  inbegrepen ( $n$  punten in totaal), waarin  $x_i$ ,  $y_i$  en  $z_i$  de coördinaten zijn en  $U_i$  de potentiaal is van elk punt  $i$ .

We leiden (4.2) af naar de coëfficiënten  $a$ ,  $b$ ,  $c$  en  $d$ , en om deze te vinden stellen we afgeleiden gelijk aan nul.

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a} = 2 \sum_i^n x_i (ax_i + by_i + cz_i + d - U_i) = 0 \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial b} = 2 \sum_i^n y_i (ax_i + by_i + cz_i + d - U_i) = 0 \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial c} = 2 \sum_i^n z_i (ax_i + by_i + cz_i + d - U_i) = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial d} = 2 \sum_i^n (ax_i + by_i + cz_i + d - U_i) = 0 \quad (4.6)$$

Deze vier vergelijkingen lossen we op onder matrixvorm, waarbij we het sommatieteken voor de eenvoud weglaten.

$$\begin{pmatrix} x_i^2 & x_i y_i & x_i z_i & x_i \\ y_i x_i & y_i^2 & y_i z_i & y_i \\ z_i x_i & z_i y_i & z_i^2 & z_i \\ x_i & y_i & z_i & n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i U_i \\ y_i U_i \\ z_i U_i \\ U_i \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Dit schrijven we als (4.8)

$$X \cdot A = U \quad (4.8)$$

We lossen (4.8) op naar  $A$  om de coëfficiënten van het hypervlak te bekomen.

$$A = X^{-1} \cdot U \quad (4.9)$$

Eens het hypervlak (4.1) voor de potentiaal door het punt  $\vec{r}_0$  gekend is berekenen we hieruit het elektrische veld door gebruik te maken van (3.1).

$$\begin{cases} E_x = -\frac{\partial U_0}{\partial x} = -a \\ E_y = -\frac{\partial U_0}{\partial y} = -b \\ E_z = -\frac{\partial U_0}{\partial z} = -c \end{cases} \quad (4.10)$$

### 4.3 Het ionentransport in de bulk door Drift.

Drift en diffusie worden apart behandeld. Het driftalgoritme beschrijft de verplaatsing van geladen deeltjes onder invloed van een elektrisch veld in een anisotroop medium. Ik zal het algoritme bespreken voor één enkel meta-ion dat zich op de tijd  $t_0$ , voor de tijdstap  $\Delta t$ , in het punt  $\vec{r}_0$  bevindt. Dit algoritme laat enkel toe dat meta-ionen bij het einde van elke tijdstap zich op een datapunt bevinden

We beginnen zoals altijd met de snelheid  $\vec{v}$  te berekenen in het punt  $\vec{r}_0$  door de lokale mobiliteitstensor  $\overline{\mu}(\vec{r}_0)$  te vermenigvuldigen met het lokale elektrische veld  $\vec{E}(\vec{r}_0)$ .

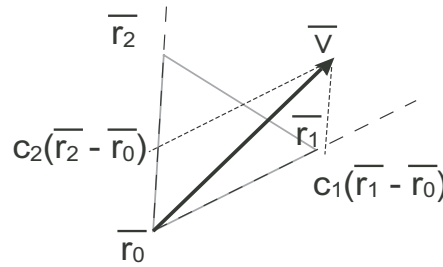
We zoeken het volume-element waarin de snelheidsvector wijst.

Elke tetraëder die  $\vec{r}_0$  omringt, kunnen we beschouwen als een coördinatenstelsel met  $\vec{r}_0$  als oorsprong en met  $(\vec{r}_i - \vec{r}_0)$  ( $i \neq 0$ ) als niet-genormeerde eenheidsvectoren. De vector  $\vec{v}$  kunnen we ontbinden in deze coördinatenstelsels. We bekomen de lineaire combinatie (4.11). De coëfficiënten  $c_i$  van (4.11) hebben als dimensie  $s^{-1}$ .

$$\vec{v} = c_1 (\vec{r}_1 - \vec{r}_0) + c_2 (\vec{r}_2 - \vec{r}_0) + c_3 (\vec{r}_3 - \vec{r}_0) \quad (4.11)$$



Er is steeds één volume-element waarvoor alle coëfficiënten  $c_i$  positief zijn. De snelheidsvector  $\vec{v}$  is dan gelegen in dit volume-element, in 3D is dit een tetraëder. Figuur 4.4 illustreert dit voor het 2D geval.



**Figuur 4.4: ontbinding van de snelheidsvector in het assenstelsel van het 2D element.**

Eens we die tetraëder gevonden hebben, die de vector  $\vec{v}$  bevat, kunnen we de procedure verder zetten. De tijd  $t^*$  die het meta-ion nodig heeft om het grensvlak van de tetraëder te bereiken, vinden we als volgt. Dat grensvlak heeft als vergelijking (4.12).

$$(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) + (\vec{r}_2 - \vec{r}_0) + (\vec{r}_3 - \vec{r}_0) = 1 \quad (4.12)$$

De coördinaten waar het meta-ion het grensvlak snijdt zijn gegeven door  $(c_1 t^*, c_2 t^*, c_3 t^*)$ . Gebruiken we deze coördinaten in (4.12) dan vinden we de tijd  $t^*$ . Het is inverse van de som van de coëfficiënten (4.13).

$$t^* = (c_1 + c_2 + c_3)^{-1} \quad (4.13)$$

Is  $\Delta t$  kleiner dan  $t^*$ , dan heeft het meta-ion een afstand  $\overrightarrow{v\Delta t}$  afgelegd en eindigt het in de tetraëder. Zoals eerder vermeld laat dit algoritme enkel toe dat meta-ionen bij het einde van elke tijdstap zich op een datapunt bevinden. Daarom wordt dit meta-ion aan één van de hoekpunten van de tetraëder toegekend door een gewogen randomschema.

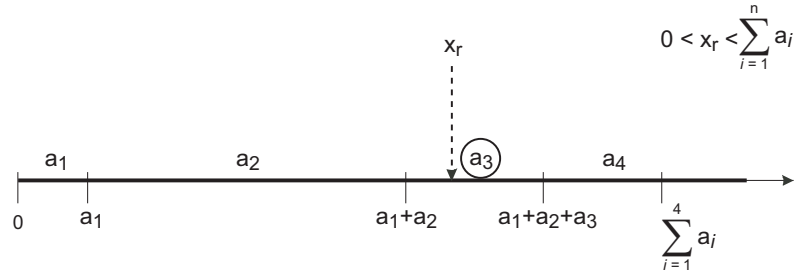
In het gewogen randomschema wordt er aan elk punt van de tetraëder een probabilliteit toegekend dat invers evenredig is met de afstand tussen  $(\vec{r}_0 + \overrightarrow{v\Delta t})$  en de hoekpunten  $\vec{r}_i$  ( $i = 0, \dots, 3$ ). Of wiskundig gesproken stelt (4.14) de ontbinding van de positie van het meta-ion voor in de hoekpunten  $\vec{r}_i$  ( $i = 0, \dots, 3$ ).

$$(\vec{r}_0 + \overrightarrow{v\Delta t}) = a_0\vec{r}_0 + a_1\vec{r}_1 + a_2\vec{r}_2 + a_3\vec{r}_3 \quad (4.14)$$

Hierin stelt de coëfficiënt  $a_i$  de probabilliteit voor om aan het hoekpunt  $\vec{r}_i$  toegekend te worden. Het gewogen randomschema met deze probabilliteiten  $a_i$  wordt als volgt geconstrueerd. We plaatsen alle probabilliteiten op een as na elkaar, elke  $a_i$  stelt dan een bereik voor (figuur 4.5). De som van alle  $a_i$ 's is het totale bereik. We laten dan een randomgenerator, met uniforme verdeling, een getal  $x_r$  genereren binnen dit totale bereik. Valt het getal  $x_r$  binnen het bereik van probabilliteit  $a_j$ , dan wordt de met  $a_j$  corresponderende gebeurtenis uitgevoerd. In dit geval wordt het meta-ion toegekend aan het punt  $\vec{r}_j$ . In figuur 4.5 valt het randomgetal  $x_r$  in het bereik van  $a_3$ .

Is  $\Delta t$  groter dan  $t^*$ , dan snijdt de vector  $\overrightarrow{v\Delta t}$  het grensvlak tegenover  $\vec{r}_0$  van de tetraëder op het tijdstip  $t_0 + t^*$  (als we aannemen dat bij het begin van de tijdstap, de tijd  $t = t_0$  was). In dit geval zetten we het meta-ion op het grensvlak op de positie  $(\vec{r}_0 + \overrightarrow{v \cdot t^*})$  en kiest het

gewogen randomschema aan welk punt het toegekend wordt. Het is evident dat voor een meta-ion op positie  $(\vec{r}_0 + \vec{v} \cdot t^*)$  de probabilliteit  $a_0$ , om toegekend te worden aan  $\vec{r}_0$ , gelijk is aan nul ( $a_0 = 0$ ). Het ligt namelijk in het vlak gedefinieerd door  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  en  $\vec{r}_3$ . Het meta-ion wordt dus aan één van deze drie punten toegekend.

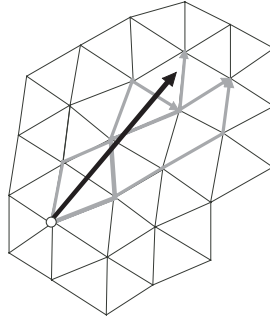


**Figuur 4.5: Constructie van een gewogen randomschema.**

De tijdstap  $\Delta t$  is nog niet volledig opgebruikt door het driftalgoritme, om verder te rekenen trekken hiervan  $t^*$  af en bekomen we  $\Delta t^*$ .

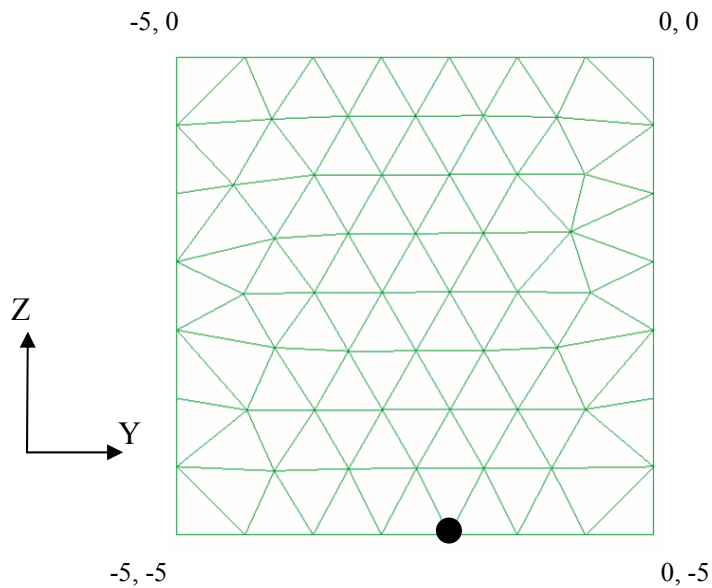
$$\Delta t^* = \Delta t - t^* \quad (4.15)$$

De volledige procedure wordt telkens herhaald, beginnende met het berekenen van een nieuwe snelheidsvector, tot de tijdstap  $\Delta t$  opgebruikt is. Op deze manier kan een meta-ion verschillende sprongen maken over verschillende punten. Figuur 4.6 illustreert dit de zwarte pijl is de verplaatsing  $\vec{v} \Delta t$ , de grijze pijlen stellen verschillende paden voor. Bij elk punt moet de snelheid  $\vec{v}$  opnieuw berekend worden, om rekening te houden met veldafbuigingen.



**Figuur 4.6: Verschillende mogelijk trajecten voor een meta-ion in een tijdstap  $\Delta t$ .**

Het pad van één individueel deeltje ligt niet vast, door het gewogen random-selectie-schema er zijn verschillende mogelijkheden. Dit introduceert numerieke diffusie. De parameters die een belangrijke invloed hebben op deze spreiding zijn de snelheid, de tijdstap en de fijnheid van de gebruikte mesh.



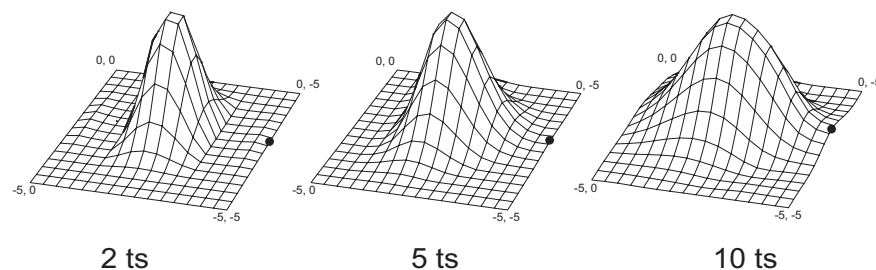
**Figuur 4.7: De 2D mesh die we als testmesh gebruiken,**

Om dit te illustreren simuleren we het drifttransport in een 2D mesh. De mesh in figuur 4.7 is opgebouwd uit 66 punten die 102 driehoekige elementen vormen. Dit is een grove testmesh waarmee we de individuele algoritmes zullen testen.

We starten met een deltadistributie van alle deeltjes op één punt (zwarte stip in figuur 4.7 en 4.8), de deeltjes zijn eenwaardig positief geladen. Het homogene elektrische veld ligt volgens de positieve Z-richting. De simulatieparameters staan in tabel 4.1.

<i>Elektrisch veld <math>E</math></i>	$10^5 \text{ V/m}$
<i>Dikte LC(<math>d_{lc}</math>)</i>	$5 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Breedte structuur</i>	$5 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Mobiliteit <math>\mu</math></i>	$5 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$

**Tabel 4-1: De parameterwaarden verplaatsing  $\delta$ -distributie in isotroop medium met constant veld.**

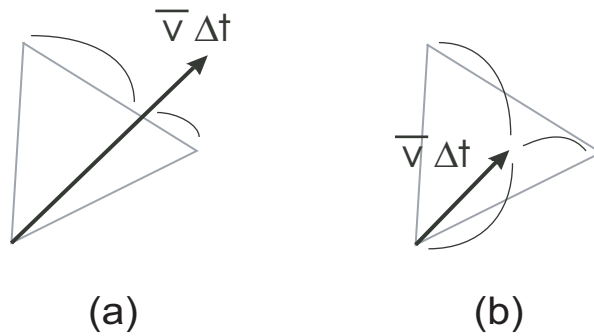


**Figuur 4.8: Simulatieresultaten van 50 ms drift van een deltadistributie vanaf de wand in de mesh van figuur 4.7, voor 2, 5 en 10 tijdstappen. (de visualisatie laat geen rechtstreekse data op de onregelmatige mesh toe, enkel geïnterpoleerde data op een regelmatig grid).**

In figuur 4.8 tonen we het aantal deeltjes op elk meshpunt voor verschillende tijdstappen, het visualisatieprogramma laat dit niet toe, daarom is de data geïnterpoleerd naar een regelmatige grid. Na 50 ms moeten de deeltjes halweg de rekenstructuur zitten. Het

zwaartepunt van de distributie voldoet hieraan, maar we zien duidelijk de spreiding.

Ook de invloed van de tijdstap valt op in figuur 4.8. Overbruggen we die 50 ms in twee tijdstappen (4.8 links) dan is de numerieke spreiding kleiner dan wanneer we 10 tijdstappen gebruiken. De oorzaak hiervan is geïllustreerd in figuur 4.9. Bij figuur 4.9 (b) is de tijdstap zo klein zodat de driftverplaatsing  $\bar{v}\Delta t$  altijd eindigt in een element. Het gewogen selectiealgoritme moet het meta-ion verdelen tussen alle hoekpunten, in 3D van de tetraëder, in 2D van de driehoek. Is de tijdstap  $\Delta t$  voldoende groot, zodat  $\bar{v}\Delta t$  buiten het element eindigt, dan kan het meta-ion enkel aan een hoekpunt van het overstaande grensvlak toegewezen worden (4.9 a). In dit laatste geval wordt gekozen tussen minder punten waardoor de kans op spreiding natuurlijk afneemt.



**Figuur 4.9: 2D illustratie voor de numerieke diffusie bij drift algoritme. (a)  $\bar{v}\Delta t$  is groter dan de elementen (b)  $\bar{v}\Delta t$  is kleiner dan de elementen.**

Het is duidelijk dat de spreiding in dit driftalgoritme afhangt van de lengte van de driftverplaatsing  $\bar{v}\Delta t$  en de grootte van de meshelementen. Vermits de snelheid afhangt van de mobiliteit en het elektrische veld en dat dit doorgaans gegeven is, verkrijgen we het ideale werkingsregime wanneer we een fijne mesh gebruiken

gecombineerd met een grote tijdstap. Ik zal verder aantonen dat onder deze voorwaarden het algoritme goed werkt.

#### **4.4 Reductie van de vrijheidsgraden in Drift.**

Een meta-ion kan vrij bewegen in vloeibaar-kristalvolume zolang het geen overgangen naar andere materialen tegenkomt. Voor de duidelijkheid noem ik alle materialen waarin het meta-ion niet mag terecht komen een verboden materiaal. Deze term omvat volumes bestaande uit glas, diëlectrische materialen, elektrodes, halfgeleider componenten, enz... alle materialen die geen vloeibaar kristal zijn. De punten op een grensvlak (bijv. een elektrode) zijn enkel toegelaten als de tetraëder waartoe het grensvlak behoort uit vloeibaar-kristalmateriaal bestaat. In deze paragraaf bespreek ik de beperkingen die opgelegd worden door de aanwezigheid van grensvlakken in het vloeibare-kristalmedium.

Eén grensvlak reduceert de driedimensionale vrijheid met één dimensie. We zullen de snelheidsvector moeten projecteren op een vlak. De aanwezigheid van twee grensvlakken zal opnieuw één dimensie kosten. Hier projecteren we de snelheid op een rechte. Zijn er drie grensvlakken aanwezig dan zit het meta-ion gevangen in dit punt en kan het enkel ontsnappen door thermische diffusie.

##### **4.4.1 Een grensvlak.**

Komt het meta-ion op een punt  $\vec{r}_0$  terecht dat een overgang is tussen het vloeibare kristal medium en een verboden materiaal en is daarenboven de snelheidsvector gericht in het verboden materiaal,

dan zullen we geen volume element in het vloeibaar kristal vinden waarin de ontbinding (4.11) positieve coëfficiënten  $c_i$  oplevert.

Het grensvlak beperkt de bewegingsmogelijkheden van het ion. De elektrische kracht loodrecht op het oppervlak wordt nu gecompenseerd door de impulsoverdracht telkens als het ion met de wand botst. De elektrische kracht evenwijdig met het oppervlak blijft wel bestaan. Dit gedrag kunnen we simuleren door is de oorspronkelijke snelheidsvector te projecteren op het grensvlak. We zoeken hiervoor eerst alle volume-elementen, die het punt  $\vec{r}_0$  bevatten, en op de grens tussen de twee materialen gelegen zijn. Voor deze volume-elementen (tetraëders) stellen we de normaalvergelijking (4.16) op van hun grensvlak (drie punten van deze elementen liggen op de grens en drie punten definiëren een vlak).

$$n_1x + n_2y + n_3z + const = 0 \quad (4.16)$$

De coëfficiënten  $n_1$ ,  $n_2$  en  $n_3$  zijn de richtingscoëfficiënten van de normaalvector, die wijst in de richting van het vloeibaar kristal. We ontbinden de snelheidsvector  $\vec{v}$  in het assenstelsel  $(\vec{r}_1 - \vec{r}_0, \vec{r}_2 - \vec{r}_0, \vec{n})$  volgens (4.17), dan is de component  $c_3$  negatief (figuur 4.10).

$$\vec{v} = c_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) + c_2(\vec{r}_2 - \vec{r}_0) + c_3\vec{n} \quad (4.17)$$

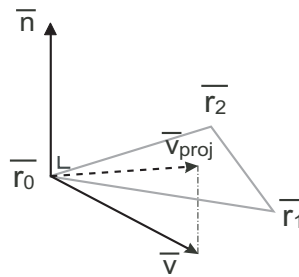
We projecteren  $\vec{v}$  loodrecht op het grensvlak.

$$\vec{v}_{proj} = c_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) + c_2(\vec{r}_2 - \vec{r}_0) \quad (4.18)$$

Automatisch vinden we de ontbinding voor de geprojecteerde snelheid  $\vec{v}_{proj}$  in het assenstelsel van het volume-element (4.11), de coëfficiënt voor  $(\vec{r}_3 - \vec{r}_0)$  is gelijk aan nul. We herhalen deze



procedure voor de verschillende elementen tot we het element vinden waarvoor alle coëfficiënten  $c_i$  van  $\vec{v}_{proj}$  positief zijn. Dit is het element waarin de geprojecteerde snelheidsvector wijst. Het verdere verloop is analoog aan de voorgaande paragraaf met als enige verschil dat de snelheid nu gegeven is door  $\vec{v}_{proj}$ .



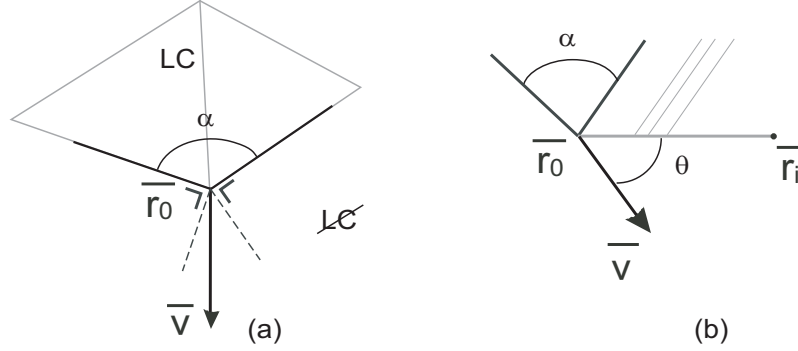
**Figuur 4.10: de projectie van de snelheidsvector op het grensvlak.**

#### 4.4.2 Twee grensvlakken.

Vinden we geen volume-element waar zelfs de geprojecteerde snelheid allemaal positieve coëfficiënten in heeft dan wijst de snelheidsvector in een ribbe. Het probleem is geschetst in figuur 4.11(a), de snelheidsvector kan onmogelijk via loodrechte projectie (vorige paragraaf) op een toegelaten driehoek (grensvlak) geprojecteerd worden. De enige uitweg is de snelheidsvector te projecteren op een toegelaten ribbe.

Twee grensvlakken maken een hoek  $\alpha$  in het vloeibaar-kristalmateriaal die kleiner is dan  $180^\circ$ . Teken we de normaalvlakken van beide vlakken in de snijlijn. Dan bestaat er een gebied afgebakend door de normaalvlakken waar er een snelheidsvector kan bestaan die niet meer kan geprojecteerd worden

op één van beide grensvlakken (figuur 4.11 a toont een doorsnede van de situatie).



**Figuur 4.11: De snelheidsvector wijst in een ribbe (a) doorsnede in een punt (b) zij aanzicht van de doorsnede.**

In dit geval projecteren we de snelheidsvector op de verbindinglijn, de ribbe tussen het punt  $\vec{r}_0$  en de eerste naburen  $\vec{r}_i$ , die de kleinste hoek  $\theta_i$  ( $\theta_i < 90^\circ$ ) heeft tussen de vector  $\vec{v}$  en  $(\vec{r}_i - \vec{r}_0)$  (figuur 4.11 b). Uit de definitie van scalair product van twee vectoren wordt dit wiskundig weergegeven door (4.19).

$$\cos \theta_i = \frac{\vec{v} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\|\vec{v}\| \|\vec{r}_i - \vec{r}_0\|} \quad (4.19)$$

We doorlopen alle verbindingsstukken tussen  $\vec{r}_0$  en zijn eerst naburen  $\vec{r}_i$  om de kleinste hoek  $\theta_i$  te vinden. Eenmaal we die gevonden hebben, is de projectie van de snelheid op die richting  $(\vec{r}_i - \vec{r}_0)$  gegeven door (4.20).

$$\vec{v}_{proj} = \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_0)}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_0\|} \cos \theta_i \|\vec{v}\| \quad (4.20)$$

Vinden we geen hoek die kleiner is dan  $90^\circ$ , dan zit het meta-ion gevangen in het punt  $\vec{r}_0$ . Enkel door thermische diffusie kan het meta-ion dan ontsnappen uit dit punt.

## 4.5 Diffusie: theorie.

Met diffusie wordt over het algemeen het fenomeen bedoeld dat deeltjes, in een vloeistof of gas, zich over de beschikbare ruimte homogeen trachten te verspreiden. Dit is een statistisch botsingsproces, deeltjes botsen met de moleculen van het medium waardoor ze een random walk beweging uitvoeren. De tweede wet van Fick is de differentiaalvergelijking die de verandering van de concentratie, door diffusie, met de tijd in een 1D-ruimte beschrijft [47].  $n$  is de concentratie,  $D$  de diffusieconstante.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \quad (4.21)$$

De oplossing van deze differentiaal vergelijking als alle deeltjes starten in een  $\delta$ -distributie is de gekende normale verdeling met  $\sigma^2 = 2Dt$  als standaard deviatie.

In dit 3D algoritme is het niet de bedoeling de differentiaalvergelijking voor de concentratie op te lossen, maar meta-ionen te gebruiken die een random walk beweging uitvoeren. De random walk beweging is enkel mogelijk door te springen van het ene meshpunt naar het andere. We zullen er de

overgangswaarschijnlijkheid opstellen om te springen tussen 2 naburige meshpunten. Alle overgangswaarschijnlijkheden om van één punt naar zijn naburen te springen samen zijn de overgangswaarschijnlijkheid voor een sprong weg van dat punt.

Het diffusiealgoritme wordt dus volledig beheerst door statistiek.

Is voor een statistisch proces het aantal gebeurtenissen dat optreedt per eenheid van tijd gekend, dan wordt hiervoor de Poisson statistiek gebruikt. [37]

In een Poisson proces treden gebeurtenissen op met waarschijnlijkheid  $\lambda$  per tijdseenheid “volledig volgens toeval”, d.i.

- de kans dat 1 gebeurtenis optreedt in een tijdsinterval van de grootte  $dt$  is  $\lambda dt$  (kans op 2 of meer is te verwaarlozen).
- Het optreden van gebeurtenissen in niet-overlappende tijdsintervallen zijn stochastisch onafhankelijk.

In dit diffusiealgoritme wordt de Poisson-statistiek gebruikt om de overgang te beschrijven van een meta-ion van één punt naar één van de naburige roosterpunten, in een tijdsinterval  $\Delta t$ . Eerst zal de waarschijnlijkheid worden berekend om over te gaan naar elk van de naburige roosterpunten. Het Monte Carlo selectiealgoritme zal dan worden toegepast in overeenstemming met de poisson statistiek.

#### 4.5.1 De individuele overgangswaarschijnlijkheid.

In een isotroop medium heeft diffusie een normale verdeling in drie dimensies. In dit geval is de kwadratische standaard deviatie  $\sigma^2$  van de normale verdeling  $\sigma^2 = 2Dt$ .

Definiëren we nu de waarschijnlijkheid  $\lambda_{ij}$  [ $s^{-1}$ ] voor een meta-ion om van het punt  $i$  naar het punt  $j$  over te gaan per tijdseenheid. De constante  $n_i$  stelt het aantal naburen voor van het punt  $i$  en de afstand tussen de naburen is  $r_{ij}$ . In het geval van een symmetrische omringing van de naburen (bij voorbeeld 12 burenen in rooster van regelmatige tetraëders) kunnen we de standaard deviatie berekenen na een elementaire tijdstap  $\Delta t$ , dit levert  $n_i r_{ij}^2 \lambda_{ij} \Delta t$ . Overeenstemming met de diffusietheorie levert dit de gezochte waarde voor de overgangswaarschijnlijkheid:

$$\lambda_{ij} = \frac{2D}{|\vec{r}_{ij}|^2} \cdot \frac{1}{n_i} \quad (4.22)$$

Deze kans neemt kwadratisch af met de afstand tussen  $i$  en  $j$ ,  $\vec{r}_{ij} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i)$ . En ze is gelijk verdeeld voor alle burenen.

In het meer algemene geval als het materiaal niet isotroop is en de roosterpunten niet perfect symmetrisch verdeeld zijn word de berekening ingewikkelder. In een driedimensionale vloeibaar-kristal situatie is deze overgangswaarschijnlijkheid afhankelijk van de meshgeometrie en de 3D diffusietensor  $\bar{\bar{D}}$ , zoals beschreven in formule (4.23):

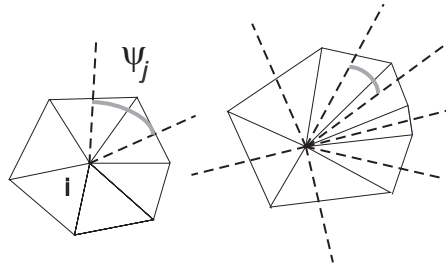
$$\lambda_{ij} = \frac{2|\bar{\bar{D}}\vec{r}_{ij}|}{|\vec{r}_{ij}|^3} \frac{\psi_j}{\Psi} \sqrt{\frac{V_j}{V_i}} \quad (4.23)$$

De diffusietensor  $\bar{\bar{D}}$  beschrijft de anisotropie van het vloeibare kristal materiaal en is gebaseerd op de lokale directororiëntatie.

$$\frac{|\bar{\bar{D}}\vec{r}_{ij}|}{|\vec{r}_{ij}|} \quad (4.24)$$

Hierin beschrijft de factor (4.24) de anisotropie langs de richting  $\vec{r}_{ij}$ , de verbinding tussen  $i$  en  $j$ .

De verhouding  $\psi_j/\Psi$  houdt verband met de angulaire spreiding van de omringende eerste naburen.  $\Psi$  is de totale ruimtehoek die het punt  $i$  kan “zien”. Ligt  $i$  in de bulk dan is  $\Psi$  uiteraard  $4\pi$ , maar indien het punt  $i$  aan een wand ligt is de totale ruimtehoek die men vanuit  $i$  kan bereiken kleiner. Hoeveel kleiner is afhankelijk van de geometrie van de wand, een vlakke wand halveert de ruimtehoek tot  $2\pi$ . De aanpassing van de totale ruimtehoek  $\psi$  is noodzakelijk om in de totale overgangswaarschijnlijkheid het gemis aan punten, door de aanwezigheid van de wand, te compenseren. Zie verder bij de totale overgangswaarschijnlijkheid.



**Figuur 4.12: De constructie van  $\psi_j$  in een 2D illustratie**

Figuur 4.12 illustreert de constructie van de ruimtehoek  $\psi_j$  in twee dimensies. Enkel twee elkaar rakende driehoeken bevatten de punten  $i$  en  $j$ . In elke driehoek nemen we de bissectrice van de hoek aan het punt  $i$ . De ruimtehoek  $\psi_j$  is in 2D de som van deze twee bissectrices in deze driehoeken. Op deze manier stelt  $\psi_j$  de ruimtehoek voor die het punt  $j$  bestrijkt, gezien vanuit het punt  $i$ . De implementatie in 3D wordt verder uitgewerkt.

Bij een symmetrische omringing van de naburige punten zal de hoek  $\psi_j$  dezelfde zijn voor alle omringende punten. Enkel bij een

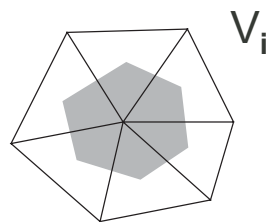
asymmetrische omringing zal deze ruimtehoek verschillen. Liggen verschillende naburen, angulair gezien, dicht bij elkaar, dan zal de ruimtehoek  $\psi_j$  voor die punten kleiner zijn dan voor punten die meer gespreid zijn. Dit wordt voorgesteld door figuur 4.12 (b).

Door de verhouding  $\psi_j/\Psi$  wordt de overgangswaarschijnlijkheid per eenheid van ruimtehoek constant gehouden. En kunnen we op deze manier compenseren voor asymmetrische omringing in de meshgeometrie.

De laatste factor is de verhouding van de volumes (4.25).

$$\sqrt{\frac{V_j}{V_i}} \quad (4.25)$$

Figuur 4.13 illustreert de definitie van de volumes  $V_i$  en  $V_j$ , ze zijn toegekend aan de punten  $i$  en  $j$ . Het volume  $V_i$  is afgebakend door de middelloodvlakken met de naburige roosterpunten. De vierkantswortel van de volumes (4.25) is de gewichtsfactor om de concentratieverdeling te compenseren voor ongewenste numerieke drift. Deze drift zou ontstaan van gebieden met een grove mesh (weinig punten, grote tetraëders) naar gebieden met gebieden met een fijne mesh (veel punten, kleine tetraëders). De volume-factor wordt gebruikt om de overgang tussen een fijne en een grove mesh op een juiste manier te laten verlopen. De berekening van de volumes voor ieder punt in 3D worden in de volgende paragrafen in detail uitgewerkt.



**Figuur 4.13: Een 2D illustratie bij het volume van een punt i.**

Bij een symmetrische omringing, in een isotroop medium, is de verhouding van de overgangswaarschijnlijkheden tussen de punten  $i$  en  $j$  is gegeven door (4.26).

$$\frac{\lambda_{i \rightarrow j}}{\lambda_{j \rightarrow i}} = \frac{V_j}{V_i} \quad (4.26)$$

Aangezien diffusie streeft naar een homogene verdeling van de concentratie, hangt de overgangswaarschijnlijkheid, van meta-ionen, naar een punt  $j$  sterk afhankelijk van het volume  $V_j$  dat het punt  $j$  vertegenwoordigd. Ze wordt namelijk groter als het volume groter wordt. Wat verstaanbaar is, want in een groter volume kunnen er meer meta-ionen zitten dan in een punt met een kleiner volume en toch bezitten beiden dezelfde concentratie.

#### 4.5.2 De totale overgangswaarschijnlijkheid.

De totale overgangswaarschijnlijkheid om uit een punt  $i$  naar één van zijn naburen te springen, is de som van alle individuele overgangswaarschijnlijkheden.

$$\lambda_i = \sum_j^{n_i} \lambda_{ij} \quad (4.27)$$

Het is dan ook de totale overgangswaarschijnlijkheid die bepalend is voor al dan niet een sprong te maken uit het punt  $i$  in een tijdsinterval  $\Delta t$ .

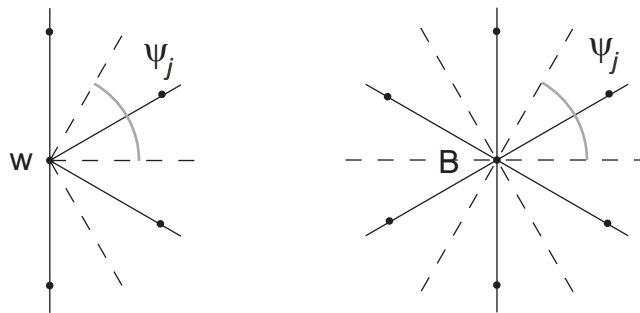
We kijken nu terug naar formule (4.23) vanuit het standpunt van de totale overgangswaarschijnlijkheid.

Wat opvalt in (4.23) zijn de twee compensatiefactoren voor de mesh. De eerste zorgt voor de asymmetrische omringing en de



tweede voor de volumecompensatie. In de bulk geeft dit geen enkel probleem. Maar nabij een wand zorgen beide compensaties voor een verhoging van diffusie van de wand weg. De eerste door de totale ruimtehoek  $\Psi$  te verkleinen en de tweede omdat een punt aan de wand automatisch een kleiner volume vertegenwoordigt. Het lijkt een dubbele compensatie.

Laten we eerst in (4.23) de volumefactor weg en vergelijken we dan de totale overgangswaarschijnlijkheid voor een punt aan de wand en één in de bulk. We redeneren voor de eenvoud in 2D (figuur 4.14). Het medium is isotroop, de omringing is symmetrisch en de naburen liggen allen op dezelfde afstand.



**Figuur 4.14: Schijnbare dubbele compensatie voor diffusie van een wand weg.**

Voor het punt  $w$  aan de wand zijn er  $n_w$  naburen, voor het punt  $B$  in de bulk hebben we  $n_B$  naburen. We zien duidelijk dat de volgende relaties bestaan voor het aantal naburen en de individuele ruimtehoeken als voor de totale ruimtehoek:

$$\sum_j^{n_w} \psi_j = \frac{1}{2} \sum_j^{n_B} \psi_j \quad (4.28)$$

$$\Psi_w = \frac{\Psi_B}{2} \quad (4.29)$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid voor beide punten is gegeven door:

$$\lambda_w = \sum_j^{n_w} \frac{2D}{r^2} \frac{\psi_j}{\Psi_w} \quad (4.30)$$

$$\lambda_B = \sum_j^{n_B} \frac{2D}{r^2} \frac{\psi_j}{\Psi_B} \quad (4.31)$$

Houden we rekening met (4.28) en (4.29), dan zijn beide overgangswaarschijnlijkheden gelijk. De verkleining van de totale ruimtehoek  $\psi$  in (4.23), bij een punt op de wand, is dus noodzakelijk om de totale overgangswaarschijnlijkheid te compenseren voor het verminderde aantal naburen.

De dubbele compensatie is dus een illusie en de verhoging voor diffusie nabij een wand is enkel veroorzaakt door de volumefactor.

### 4.5.3 Poisson Diffusie.

Om te weten of een meta-ion, tijdens het tijdsinterval  $\Delta t$ , een sprong maakt naar een ander punt (een transitie) of niet, gebruiken we de Poissonstatistiek. Formule (4.32) berekent de kans  $P$  voor een meta-ion, bij  $t = 0$ , op het punt  $i$ , met totale overgangswaarschijnlijkheid  $\lambda_i$ , minstens één sprong zal maken voor de tijd  $\Delta t$ .

$$P(t) = 1 - e^{-\lambda_i t} \quad (4.32)$$

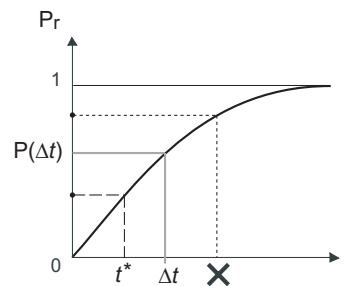
Figuur 4.15 toont het verloop van deze functie  $P$ , er valt duidelijk te zien dat de kans  $P$  op een transitie toeneemt met de grootte van de tijdstap  $\Delta t$ . Een random waarde, met een uniforme verdeling tussen

0 en 1, de estimator  $P_r$  genaamd, wordt gebruikt om te bepalen of er een transitie heeft plaatsgevonden in het interval  $\Delta t$ .

Indien  $P_r$  groter is dan  $P(\Delta t)$  was geen transitie in dat tijdsinterval. Is  $P_r$  kleiner dan was er een transitie op het tijdstip  $t^*$ , afhankelijk van  $P_r$  en (4.33) (figuur 4.15).

$$t^* = -\frac{\ln(P_r - 1)}{\lambda_i} \quad (4.33)$$

Het gewogen randomnesschema uit paragraaf 4.3 wordt gebruikt om te bepalen naar welke nabuur het meta-ion zal springen. Hierin worden ditmaal de individuele overgangswaarschijnlijkheden  $\lambda_{ij}$  gebruikt.



**Figuur 4.15: bepaling van een transitie bij Poisson diffusie. De curve is zuiver illustratief.**

Het meta-ion is nu op de tijd  $t^*$  in het punt  $j$  toegekomen, het Poisson diffusiealgoritme moet nu herhaald worden met de resterende tijd  $\Delta t^*$  (4.15). Hierdoor bekomen we een tijdstap-onafhankelijk diffusiealgoritme.

#### 4.5.4 Correcte Diffusie.

Klopt dit allemaal wel? Om te kunnen vergelijken moeten we de concentratie definiëren. De concentratie wordt gegeven per meshpunt  $i$  en is het aantal ionen, een veelvoud van het aantal meta-ionen, gedeeld door het volume  $V_i$  die het meshpunt voorstelt (zie paragrafen 4.5.1 en 4.6.1.1).

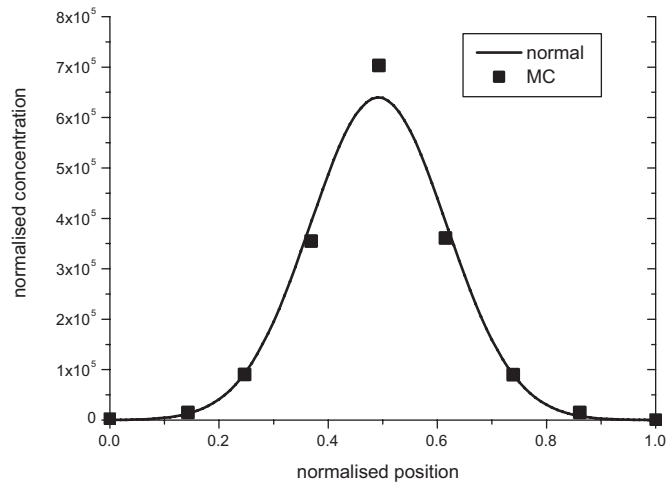
Om dit diffusiealgoritme te testen starten we met een  $\delta$ -distributie van meta-ionen in één punt en laten we dit diffunderen. De simulatieparameters van deze 2D simulatie staan in tabel 4.2. We gebruiken de mesh uit figuur 4.7. De positie van het startpunt is niet perfect in het midden van de structuur, maar ligt op het dichtste meshpunt.

<i>Dikte LC(<math>d_{lc}</math>)</i>	$5 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Breedte structuur</i>	$5 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>y-positie startpunt</i>	$2,14 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>z-positie startpunt</i>	$2,46 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Mobiliteit <math>\mu</math></i>	$5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/Vs$
<i>Aantal meta-ionen</i>	20.000

**Tabel 4-2: De parameterwaarden voor de 2D simulatie van een  $\delta$ -distributie in isotroop medium, enkel onderhevig aan diffusie. we gebruiken de mesh uit figuur 4.7**

We herleiden de verdeling naar één dimensie (volgens de  $z$ -richting), dit laat een nauwkeuriger vergelijking toe. De  $z$ -richting werd gekozen omdat, zoals duidelijk te zien is op figuur 4.7, veel meshpunten ongeveer dezelfde  $z$ -positie hebben, het zijn deze posities die gebruikt worden in figuur 4.16. In figuur 4.16 zien we het resultaat na 150 ms. De overeenkomst is zeer goed, vooral omdat we maar enkele datapunten in het histogram hebben.

Als tweede test bekijken we de invloed van anisotropie en de tijdstap. Table 4.3 toont de simulatieparameters van deze 2D simulatie. Opnieuw gebruiken we de mesh uit figuur 4.7.

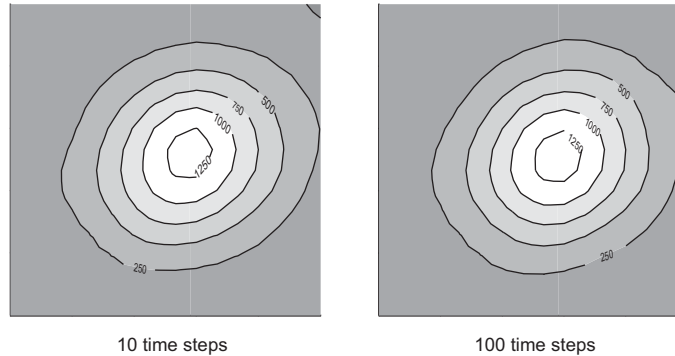


**Figuur 4.16: 1D histogram volgens z-as, vergelijk tussen analytische oplossing en simulatieresultaten in de 2D mesh van figuur 4.7. De data is genormaliseerd op het oppervlak om het vergelijking met de normale verdeling mogelijk te maken.**

<i>Dikte LC(<math>d_{lc}</math>)</i>	$5 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Breedte structuur</i>	$5 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>y-positie startpunt</i>	$2,14 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>z-positie startpunt</i>	$2,46 \times 10^{-6} \text{ m}$
<i>Mobiliteit <math>\mu_{\perp}</math></i>	$5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{Vs}$
<i>verhouding <math>\mu_{//}/\mu_{\perp}</math></i>	1.8
<i>Twisthoek <math>\varphi</math></i>	$90^{\circ}$
<i>Tilhoek <math>\theta</math></i>	$45^{\circ}$
<i>Aantal meta-ionen</i>	20.000

**Tabel 4-3: De parameterwaarden  $\delta$ -distributie in anisotroop medium, enkel onderhevig aan diffusie.**

Figuur 4.17 zien we het resultaat na 300 ms voor 10 (links) en 100 (rechts) tijdstappen. Beide resultaten zijn onderhevig aan randomruis, maar zijn in overeenstemming met elkaar.



**Figuur 4.17: 2D Simulatieresultaat na 150 ms, invloed van de anisotropie en de tijdstap. links 10 tijdstappen, rechts 100. We gebruiken de mesh van figuur 4.7.**

Deze resultaten tonen aan dat het diffusiealgoritme goed werkt en onafhankelijk is van de tijdstap. Na voldoende lange tijd verdelen de meta-ionen zich over alle beschikbare punten, zodat de concentratie homogeen wordt doorheen de rekenstructuur.

## 4.6 Implementatie parameterwaarden.

Hoewel hedendaagse computers een enorm grote geheugen capaciteit hebben, blijkt in de praktijk de mesh-grootte erg bepalend te zijn voor de snelheid van de simulatie. Vooral het hoofdalgoritme om de directorbeweging te bepalen, afhankelijk van de potentiaal, gebruikt zeer veel geheugen. Elke extra belasting moet dus vermeden worden. Dit ionentransportalgoritme vertegenwoordigt in vele gevallen slechts een geringe correctie op het elektrische veld door de aanwezigheid van ladingen in het

vloeibaar kristal materiaal, zodat ik ervoor gekozen heb om parameters die via simpele (snelle) deelalgoritmes kunnen berekend worden niet in het geheugen te bewaren.

Het hier beschreven algoritme maakt gebruik van verschillende parameters die voor één welbepaalde simulatie niet veranderen in de tijd. We kunnen veel rekentijd uitsparen door die parameters slechts éénmaal te berekenen en ze in het computergeheugen te bewaren. Uiteraard zal het gebruikte geheugen hierdoor sterk toenemen. We dienen de voor- en de nadelen af te wegen tegenover elkaar.

In de implementatie van dit algoritme heb ik het volgende gekozen.

- Alle data die beschikbaar is voor de potentiaal- en de directororiëntatie- berekeningen wordt ter beschikking gesteld voor het ionen transportalgoritme, deze data wordt gedeeld door alle algoritmes.
- Alle extra parameterwaarden verbonden aan een individueel datapunt wordt uitgerekend en bijgehouden.
- Per punt wordt een lijst met volume-elementen waartoe het toe behoort bijgehouden.
- Nabuurlussen en bijhorende parameterwaarden worden telkens waar nodig uitgerekend.

Het eerste puntje hoeft geen verdere uitleg. In het ideale geval (computer met veel geheugen capaciteit) kan men alle onveranderlijke simulatieparameters bijhouden. Ik heb een keuze gemaakt rekening houdend met de complexiteit van de berekeningen en de hoeveelheid data die bijgehouden moet worden. Dit omdat het 3D LCD-model op elke hedendaagse computer uitvoerbaar moet zijn.

#### 4.6.1 Gedeelde en bewaarde parameterwaarden.

De meest voor de hand liggende parameters zijn beschikbaar uit de potentiaal- en directorberekening en worden gedeeld tussen alle algoritmes. Van alle punten: de positie  $\vec{r}_i$ , de potentiaal  $U_i$  en de directororiëntatie  $\vec{n}_i$ . Van alle volume-elementen (tetraëders): de vier punten en het materiaatype. Van alle oppervlakte-elementen (driehoeken): de drie punten, het materiaatype, het volume-element waartoe het behoort (bij verschillende tetraëders krijgt die uit vloeibaar kristalmateriaal de voorrang) en het eenzame punt (overige punt van de tetraëder).

Het ionentransport algoritme heeft extra parameters nodig. Die worden berekend uit de gedeelde parameters en de lijst met volume-elementen waartoe het punt behoort of de eerste naburen (zie ook paragraaf 4.1.1). Niet alle parameterwaarden worden bewaard, hier volgt een bespreking van de bewaarde parameters.

##### 4.6.1.1 Bewaarde data: Volume voor een punt.

Aan elk punt wordt een volume toegekend. In gebieden met een grove mesh zijn er weinig punten zodat elk punt correspondeert met een groot volume. In een fijne mesh daarentegen correspondeert met elk punt een klein volume.

Het  $\frac{1}{4}$  van het volume van een tetraëder (4.34) wordt toegekend aan de vier punten. Het volume  $V_i$  toegekend aan het punt  $i$ , is de som van een kwart van de volumes van de tetraëders waartoe het punt  $i$  behoort.



$$V = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & z_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & z_3 & 1 \\ x_4 & y_4 & z_4 & 1 \end{vmatrix} \quad (4.34)$$

#### 4.6.1.2 Bewaarde data: Inverse matrix hypervlak.

Om het elektrische veld in een punt te berekenen heb ik in paragraaf 4.2 een hypervlak voor de potentiaal gefit aan de naburen van dat punt. Uit de matrixvergelijkingen (4.8) en (4.9) halen we de matrix  $X$  (4.35).

$$X = \begin{pmatrix} x_i^2 & x_i y_i & x_i z_i & x_i \\ y_i x_i & y_i^2 & y_i z_i & y_i \\ z_i x_i & z_i y_i & z_i^2 & z_i \\ x_i & y_i & z_i & n \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

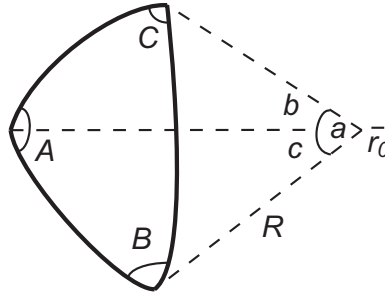
Deze matrix  $X$  inverteren we volgens de Gauss-Jordan methode om zo de vergelijking van het hypervlak te bekommen (4.1).

In de matrix  $X$  komen enkel de coördinaten van de omringende punten voor, zodat deze inversie ook op voorhand kan berekend worden. En omdat de inverse van een symmetrische matrix ook symmetrisch is hoeven we maar 10 elementen bij te houden in het geheugen.

Dit vereenvoudigt vergelijking (4.9) tot een simpele matrixvermenigvuldiging tijdens het verloop van de tijdstappen. Wat winst in de reketijd oplevert.

#### 4.6.1.3 Bewaarde data: Ruimtehoek.

De uitzondering op de regel is de berekening van de ruimtehoek  $\varphi_j$ . We kennen de lijst met volume-elementen waartoe een punt  $\vec{r}_0$  behoort en niet de naburen zelf (deze worden immers niet bewaard, maar telkens opnieuw uitgerekend). We berekenen de ruimtehoek in het punt  $\vec{r}_0$  ingesloten door een tetraëder.



**Figuur 4.18: Definities om het oppervlak van een sferische driehoek te bepalen.**

Figuur 4.18 stelt een sferische driehoek voor op een bol met straal  $R$  en middelpunt  $\vec{r}_0$ . De oppervlakte  $S$  van deze sferische driehoek wordt gegeven door (4.36), met  $A$ ,  $B$  en  $C$  de hoeken in radialen.  $E$  wordt het sferische exces genoemd en is gegeven door l'Huilier's theorema (4.37). Hierin zijn  $a$ ,  $b$  en  $c$  de booglengtes en  $s = (a+b+c)/2$  de halve omtrek. Het sferische exces is de ruimtehoek.

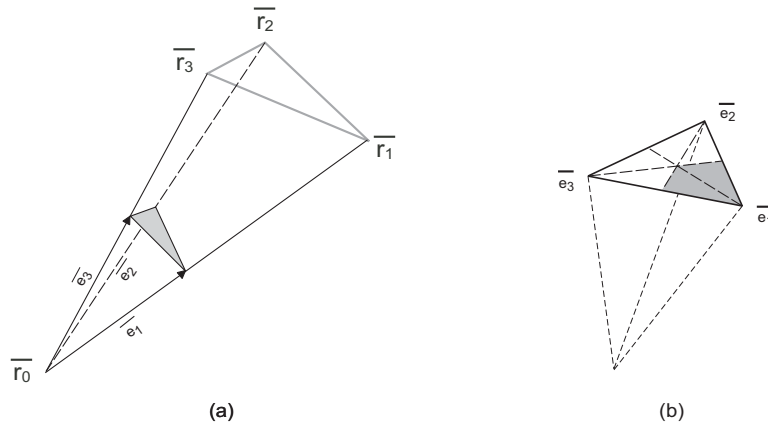
$$S = R^2 [(A + B + C) - \pi] = R^2 E \quad (4.36)$$

$$\tan\left(\frac{1}{4}E\right) = \sqrt{\tan\left(\frac{1}{2}s\right) \tan\left[\frac{1}{2}(s-a)\right] \tan\left[\frac{1}{2}(s-b)\right] \tan\left[\frac{1}{2}(s-c)\right]} \quad (4.37)$$

Om de berekeningen te versnellen gebruik ik de volgende benadering om de ruimtehoek te bepalen.

Omdat de definitie van de totale ruimtehoek de oppervlakte van een bol met straal 1 is. Benaderen we deze ruimtehoek door het oppervlak te bepalen van de driehoek ingesloten door de eindpunten van de eenheidsvectoren  $\vec{e}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) (4.38).

$$\vec{e}_i = \frac{(\vec{r}_0 - \vec{r}_i)}{\|\vec{r}_0 - \vec{r}_i\|} \quad (4.38)$$



**Figuur 4.19: Constructie om de ruimtehoek te berekenen. (a) bepaling van de ruimtehoek per element, (b) toekennen van 1/3 aan de naburen (dit komt overeen met de gearceerde oppervlakte begrensd door de zwaartelijnen).**

Figuur 4.19(a) illustreert deze constructie. We berekenen de oppervlakte van deze driehoeken voor alle volume-elementen die  $\vec{r}_0$  bevatten en die als materiaaltype vloeibaar kristal hebben. De oppervlakte voor een driehoek wordt gegeven door (4.39).

$$S = \frac{1}{2} \sqrt{\begin{vmatrix} y_1 & z_1 & 1 \\ y_2 & z_2 & 1 \\ y_3 & z_3 & 1 \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} z_1 & x_1 & 1 \\ z_2 & x_2 & 1 \\ z_3 & x_3 & 1 \end{vmatrix}^2 + \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}^2} \quad (4.39)$$

De som van al deze driehoeken is de benadering voor de totale ruimtehoek  $\Psi$ . Deze werkwijze is algemeen geldig. We hoeven geen veiligheid in te bouwen voor punten die op grensovergangen liggen tussen het vloeibare kristal medium en een verboden materiaal. De totale ruimtehoek zal enkel die in het vloeibaar kristal medium zijn.

De ruimtehoek  $\psi_j$  is echter gedefinieerd als de “hoek in de ruimte, gezien vanuit het punt  $\vec{r}_0$ , dat toegekend is aan zijn nabuur  $\vec{r}_j$ ”. Vermits we enkel de elementen bijhouden en niet de naburen van een punt berekenen we deze ruimtehoek telkens opnieuw als de naburen van een punt bepaald worden (zie volgende paragraaf).

Eens de naburen bepaald zijn worden de ruimtehoeken van een element verdeeld over de drie punten van het grensvlak. De ruimtehoek  $\psi_j$  “aan de nabuur  $\vec{r}_j$ ” is de som van telkens één derde ruimtehoek van de elementen die zowel  $\vec{r}_j$  als  $\vec{r}_0$  bevatten (figuur 4.19(b)).

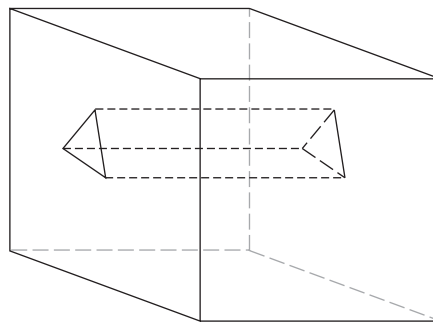
#### 4.6.2 Niet bewaarde parameterwaarden.

De nabuurpunten worden telkens opnieuw uitgerekend, vertrekkende van de elementen waartoe een punt behoort. Deze procedure is bijzonder simpel als we vertrekken van de elementen. Immers alle andere hoekpunten van die elementen zijn de naburen. We moeten er enkel voor zorgen dat elk punt slechts éénmaal in de lijst opgenomen is. Hieruit kunnen dan de verwante parameters berekend worden.

## 4.7 Periodieke randvoorwaarden.

Net zoals bij de tweedimensionale simulaties zijn de randen van de rekenstructuur in  $X$ - en  $Y$ -richtingen periodiek. Om periodieke randvoorwaarden te kunnen implementeren dient de mesh in eerste instantie dergelijke randvoorwaarden te ondersteunen.

Het GiD-pakket dat we hier gebruiken om de mesh te genereren ondersteunt periodieke randvoorwaarden. In twee parallelle vlakken, die we speciaal als periodiek dienen te definiëren, worden de punten op dezelfde positie in beide vlakken geplaatst. Op die manier worden prisma's gevormd (met een driehoek als grondvlak). Figuur 4.20 illustreert de vorming van prisma's om de mesh periodieke randvoorwaarden te geven.



**Figuur 4.20: creatie van prismavormige volume-elementen om periodieke randvoorwaarden in de mesh te creëren.**

Twee punten die met elkaar corresponderen in twee parallelle periodieke vlakken noemen we equivalent (stippellijn). Fysisch zijn het twee verschillende punten met elk hun nummer en verschillende elementen waartoe ze behoren. Maar we moeten ze opvatten als zijnde één en hetzelfde punt in de algoritmes.

Voor het driftalgoritme betekent dit concreet het volgende. Wanneer de snelheidsvector van een meta-ion dat zich bevindt op

een punt aan het periodiek grensvlak, naar buiten wijst, wordt het meta-ion verplaatst naar het corresponderende punt op het andere oppervlak.

Voor diffusie moeten we overgangswaarschijnlijkheid berekenen voor beide punten alsof ze één waren. Dat betekent de volumes en totale ruimtehoeken optellen en rekening houden met meer naburen.

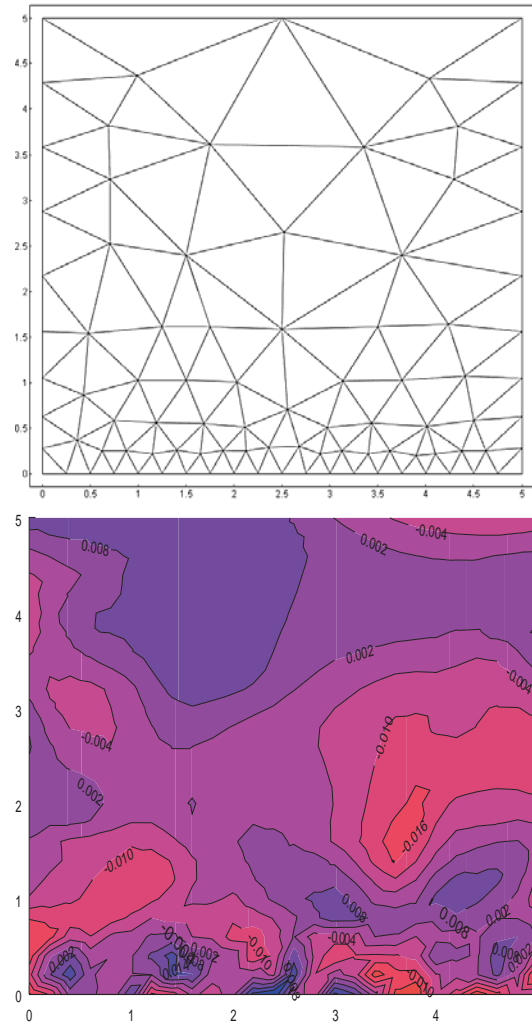
## 4.8 De Nauwkeurigheid

### 4.8.1 Diffusie

Om het geïmplementeerde diffusiealgoritme te testen maken we gebruik van een kubus ( $5 \times 5 \times 5 \text{ } \mu\text{m}^3$ ) zonder periodieke randvoorwaarden, waarin ik een asymmetrische mesh heb gegenereerd. Wegens visualisatiebeperkingen toont figuur 4.21 (boven) de driehoekige grenselementen van het XZ-zijvlak. Als test laat ik de meta-ionen diffunderen gedurende 1 s, startende van een homogene concentratieverdeling van de meta-ionen in de kubus. De homogene concentratie wordt gerealiseerd op basis van de volumes toegekend aan alle meshpunten.

We gebruiken twee éénwaardige ionsoorten met beiden een mobiliteit van  $5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{Vs}$  en met een tegengestelde lading. De ladingsdistributie van elk ionsoort is initieel  $1 \text{ C/m}^3$ . We visualiseren de ladingsdistributie na 100 ms in een XZ-vlak op  $y = 2.5 \text{ } \mu\text{m}$  in figuur 4.21 (onder). (De ladingsdistributie wordt gebruikt omdat ik voor de visualisatie gebruik maak van een speciaal programma geschreven door Richard James)

De resultaat van de ladingsdistributie is nagenoeg overal nul, de maximale variatie is  $\pm 0.02 \text{ C/m}^3$ . Dit uitstekende resultaat toont aan dat het diffusiealgoritme correct werkt.



**Figuur 4.21: Diffusietest. (boven) XZ-grensvlak van een kubus met asymmetrische mesh. (onder) Het resultaat na 1 s diffusie.**

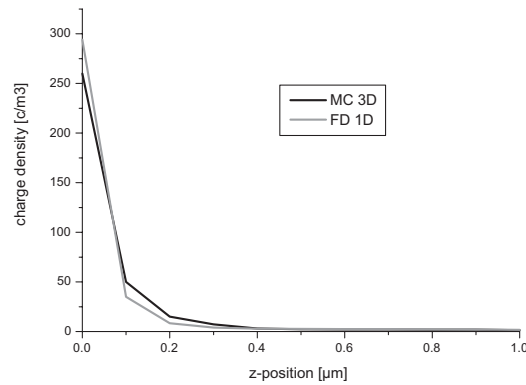
### 4.8.2 Eendimensionale simulatie

Hoe nauwkeurig is dit volledige model? We wisten al dat het ideale werkingsregime voor het driftalgoritme een fijne mesh is met grote tijdstappen. Diffusie werkt zeer goed.

We testen dit 3D-model, in het ideale regime, door een ééndimensionale structuur uit te rekenen en de resultaten te vergelijken met het betrouwbare 1D-FD simulatieprogramma. De teststructuur is een 5  $\mu\text{m}$  vloeibare kristallaag met aan beide zijden een aligneringslaag van 100 nm. De 3D structuur is  $2 \times 2 \times 5.2 \mu\text{m}^3$  groot en is opgebouwd uit 2394 punten en 10919 volume elementen. De gemiddelde afstand tussen twee punten is 0.15  $\mu\text{m}$ , dit is een zeer fijne mesh. Het vloeibaar-kristal materiaal wordt isotroop verondersteld. We gebruiken een positieve en een negatieve ionsoort met respectievelijke mobiliteiten  $5 \times 10^{-10}$  en  $1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$ . In de beginsituatie zijn beide ionsoorten homogeen verdeeld, over de elektrodes wordt een spanning van 2 V aangebracht. De tijdstap is 5 ms. De afstand afgelegd in 1 tijdstap is  $\sim 1 \mu\text{m}$  voor de positieve ionen en  $\sim 0.2 \mu\text{m}$  voor de negatieve ionen.

Om de gegevens in beide simulatieprogramma's te kunnen vergelijken wordt de data geïnterpoleerd naar een regelmatige grid. Van deze regelmatige 3D grid nemen we dan het gemiddelde van alle gridpunten op een welbepaalde z-waarde, deze waarden worden dan vergeleken met het resultaat van het 1D FD programma. Als vergelijkende data nemen we de ladingsdichtheid  $\rho$  (de som van de concentraties elk vermenigvuldigd met de lading van de ionsoort).

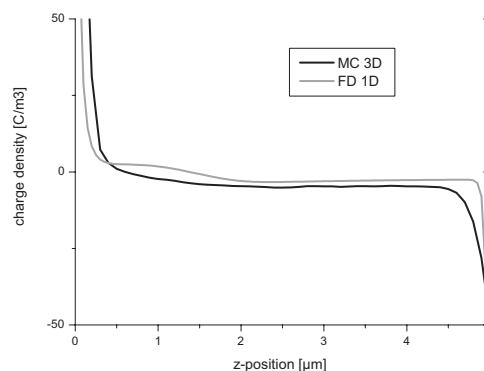




**Figuur 4.22: Vergelijking eindistributie nabij de interface tussen 1D (grijze lijn) en 3D (zwarte lijn) simulatiemodel.**

Figuur 4.22 toont de ladingsdichtheid, nabij de interface, berekent met de twee programma's na het bereiken van de evenwichtstoestand ( $t = 250$  ms). De resultaten van beide programma zijn nagenoeg identiek.

De resultaten van deze simulatie na 30 ms zijn te zien in figuur 4.23. De algemene trend is voor beide simulaties dezelfde. De ladingsdichtheid is in de bulk overwegend negatief, want de negatieve ionen zijn de traagste en zijn nog onderweg naar de positieve elektrode. Het grootste deel van de positieve ionen hebben al de negatieve elektrode bereikt.



**Figuur 4.23: Vergelijking ladingsdistributie tussen 1D (grijze lijn) en 3D (zwarte lijn) simulatiemodel, na 30 ms.**

Wat is de oorzaak van het verschil tussen deze twee simulatieresultaten? Kwantitatief is het 1D FD programma correct. Dit werd uitgebreid getest in het verleden en wordt hier als de referentie beschouwd.

Ten eerste is het 3D algoritme gebaseerd is op een onregelmatige mesh. Om de gegevens in beide bovenstaande figuren te kunnen vergelijken werd de data (in beide gevallen) geïnterpoleerd naar een regelmatige grid. En ten tweede veroorzaakt de gewogen randomselectieprocedure ongewenste numerieke diffusie. Hierdoor is het resultaat van de tussenliggende tijden minder goed. Maar kwalitatief geeft het 3D algoritme de juiste trend aan.

Hier moet ik echter een kritische noot aan toevoegen. Deze test geeft aan dat de eindistributie van het algoritme de correcte oplossing is. In deze simulatie heb ik echter alle voordeel aan het algoritme gegeven door te de simulatie uit te voeren met een fijne mesh en de tijdstap voldoende groot te nemen. De tijdstap is goed gekozen voor een realistische simulatie, de ladingsdistributie moet teruggekoppeld worden naar de potentiaalberekening. Te grote tijdstappen kunnen dit algoritme onstabiel maken, in de praktijk nemen we dan ook een tijdstap tussen 5 ms en 0.5 ms.

De mesh is te fijn om praktisch bruikbaar te zijn in een realistische simulatie. Het totale volume van de 3D structuur die ik hier gebruikt heb is  $2 \times 2 \times 5.2 \text{ } \mu\text{m}^3$ . Dit is zeer klein, waardoor deze simulatie kan uit uitgerekend worden samen met de directororiëntatie. De totale rekentijd om 250 ms te berekenen was 78 uur en 20 minuten op een pc met 1Ghz kloksnelheid. De tijdstap om de directororiëntatie stabiel te berekenen is 5  $\mu\text{s}$ .

Het is niet mogelijk om een realistische simulatie, waar het rekenvolume gemakkelijk  $10 \times 20 \times 5 \text{ } \mu\text{m}^3$  is, een dergelijke fijne mesh te gebruiken.

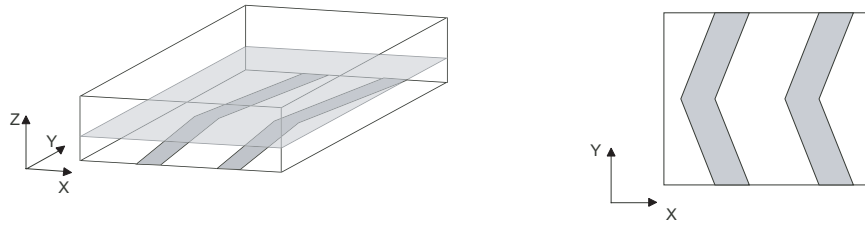
In de realiteit zal dit algoritme niet opereren in zijn ideale werkingsregime.

## 4.9 Toepassing: De Double Domain IPS.

Net zoals bij het tweedimensionale algoritme uit het vorige hoofdstuk bespreken we de invloed van de ionenbeweging, via het elektrische veld, op de directororiëntatie. Als toepassing voor dit driedimensionale algoritme bespreken we de double-domain In-Plane-Switching structuur (DD-IPS).

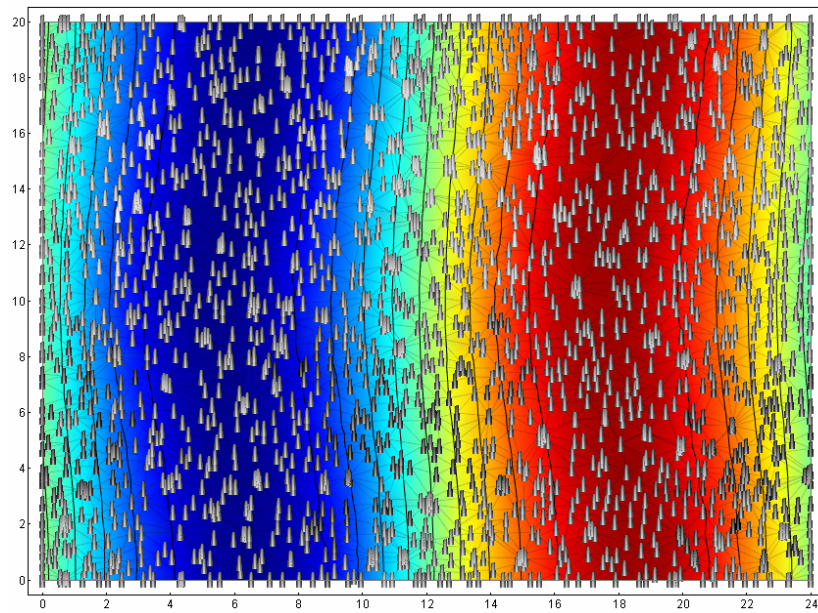
De DD-IPS is een variant van de gewone IPS, waarvan de elektroden een zigzag-vorm hebben (figuur 4.24). Hierdoor creëren we twee domeinen waarin de moleculen een andere eindoriëntatie bezitten. Deze structuur verbetert de kleurverschuiving, bij schuine kijkhoeken, met 50% in vergelijking met een conventionele IPS [33]. Dit type wordt ook wel *Super-In-plane-Switching* genoemd bij commerciële displays.

De rekenstructuur die we hier gebruiken is  $24 \text{ } \mu\text{m}$  breed,  $20 \text{ } \mu\text{m}$  hoog en  $4 \text{ } \mu\text{m}$  dik. De glasplaten zijn evenwijdig met elkaar in de Z-richting. Aan beide glasplaten werd een aligneringslaag van 100 nm dikte aangebracht, de dikte van de elektrodes werd verwaarloosd. De 3D structuur is opgebouwd uit 5062 punten en 23517 volume elementen. De gemiddelde afstand tussen twee punten is  $1 \text{ } \mu\text{m}$ . De overige simulatie parameters zijn in tabel 4-4 te vinden.

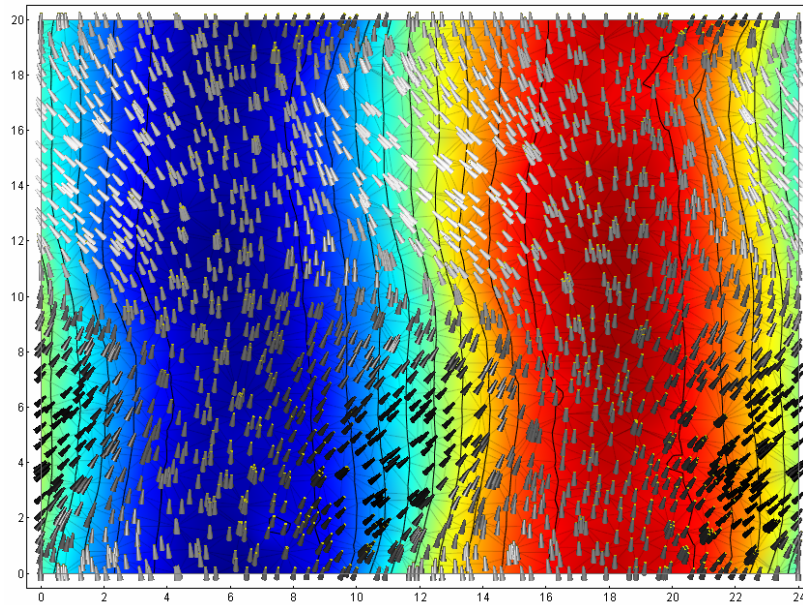


**Figuur 4.24:** Illustratie lay-out van een Double-Domain-In-plane-Switching structuur. De glasplaten zijn evenwijdig met elkaar in de  $z$ -richting.

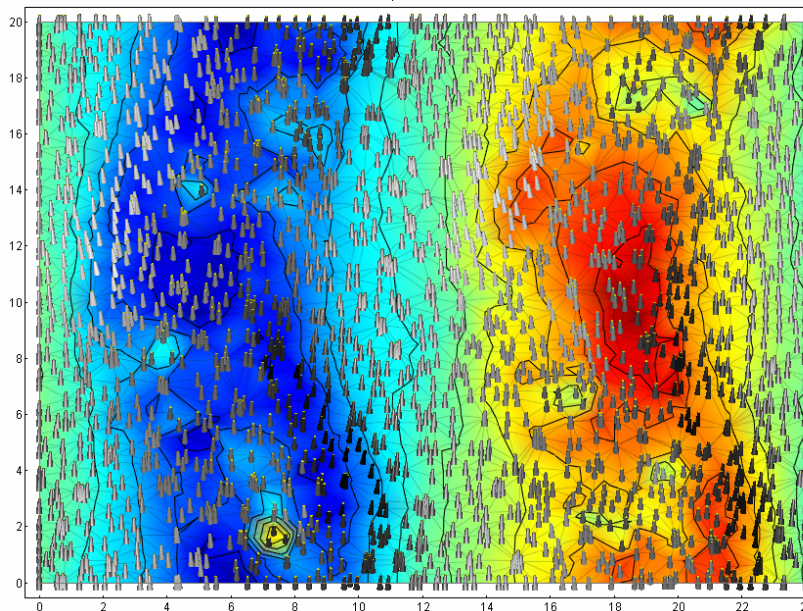
Figuren 4.25, 4.26 en 4.27 tonen de potentiaalverdeling en directororiëntatie voor een vlak evenwijdig met de glasplaten in het midden van de structuur, op  $z = 2 \mu\text{m}$ . Het middenvlak is ook voorgesteld op figuur 4.24.



**Figuur 4.25:** De directororiëntatie en de potentiaalverdeling voor de DD-IPS in de beginsituatie.



**Figuur 4.26:** De directororiëntatie en de potentiaalverdeling voor de DD-IPS met lage ionenconcentratie, na 250 ms.



**Figuur 4.27:** De directororiëntatie en de potentiaalverdeling voor de DD-IPS met hoge ionenconcentratie, na 250 ms.

In de beginsituatie zijn alle moleculen volgens de Y-as georiënteerd (figuur 4.25). We vergelijken na 250 ms de situatie met lage ionenconcentratie ( $N = 10^{18} \text{ m}^{-3}$ , figuur 4.26) met deze met een hoge ionenconcentratie ( $N = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ , figuur 4.27).

Het resultaat in figuur 4.26 toont duidelijk de invloed van de zigzag lay-out van de elektroden. Er ontstaan twee domeinen, binnen elke domein krijgen we de klassieke IPS-rotatie.

Verhogen we de ionenconcentratie dan wordt het elektrische veld tussen de elektroden gecompenseerd. Zodat de moleculen terug roteren naar hun initiële oriëntatie (figuur 4.27). Het elektrische veld is enkel boven de elektroden sterk genoeg om de moleculen verticaal te tilten.

$K_1=K_2=K_3$	12.6 pN
$\gamma$ (rot. visc.)	123 mPa.s
$\Delta\epsilon$	16.4
$\epsilon_{\perp}$	5.8
$\theta_{init}$	2°
$\phi_{init}$	0°
$\epsilon_{AL}$	3.5
$\mu^+_{\perp}$	$1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$
$\mu^-_{\perp}$	$1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{Vs}$
$\mu_{\parallel}/\mu_{\perp}$	1.8
$Z^{\pm}$	1
Aantal Meta-ionen	100.000
$T$	300 K
$V_{applied}$	5 V

Tabel 4-4: De parameterwaarden van de DD-IPS simulatie.

#### 4.10 Discussie en Besluit.

Op dit punt is het belangrijk zich het volgende te realiseren. Het 1D FD ionentransport-algoritme heeft veel spatiale intervallen nodig, en kan daardoor ook maar kleine tijdstappen nemen, om tot het correcte resultaat te komen. Indien we dit algoritme zouden uitbreiden naar drie dimensies, dan zou de rekentijd exponentieel met de dimensie toenemen.

Driedimensionale berekeningen zijn rekenintensief, wat leidt tot lange reketijden. We moeten rekening houden met het feit dat de invloed van de ionaire lading op het elektrische veld meestal een secundair effect is. Dan is de Monte Carlo benadering met een beperkt aantal meta-ionen gerechtvaardigd.

Het was de intentie om een snel driedimensionaal ionentransport model te ontwikkelen, kwantitatieve nauwkeurigheid werd hiervoor opgeofferd. De nauwkeurigheid kan verbeterd worden door een fijne mesh te gebruiken en zeer veel meta-ionen, maar de kost hiervan is de toename in reketijd.

In paragraaf 4.8, bij de berekening van de eendimensionale structuur, heb ik aangetoond dat dit algoritme de eindverdeling in steady-state correct berekent. Indien we dus een fijne mesh gebruiken en de tijdstappen voldoende hoog nemen kunnen we de numeriek ruis maximaal onderdrukken. Ze helemaal uitschakelen is niet mogelijk. Waardoor, zelfs in het ideale werkingsregime, de tussenliggende resultaten niet bruikbaar zijn voor kwantitatief onderzoek. Het probleem ligt bij het driftalgoritme.

Daarnaast moeten we ons ook realiseren dat bij een realistische simulatie de mesh veel grover is en we dus niet meer in het ideale werkingsregime zitten van dit 3D Monte Carlo

ionentransport algoritme. Hierdoor kunnen we de ionentransportsimulaties enkel kwalitatief gebruiken.

Niettegenstaande deze beperkingen levert dit driedimensionaal model aanvaardbare resultaten en is dit een uitstekend algoritme om problemen op te sporen bij 3D configuratie in een vloeibaar-kristalcel. Om deze problemen in detail te onderzoeken moeten we gebruik maken van het 2D algoritme uit het voorgaande hoofdstuk.



## Hoofdstuk 5

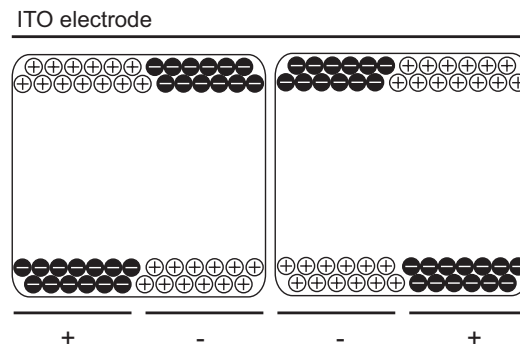
# Toepassing: Elektroforetische inkt

Ionentransport in vloeibaar-kristalbeeldschermen is niet de enige toepassing van de algoritmes beschreven in de vorige hoofdstukken. Elk systeem waarin geladen deeltjes bewegen onder invloed van een elektrisch veld, kan met deze algoritmes beschreven worden. Een interessante toepassing is elektroforetische inkt, kortweg e-ink.

### **5.1 Inleiding E-ink.**

Elektroforetische inkt is een type display dat valt onder de noemer elektronisch papier. Microgeëncapsuleerde elektroforetische beeldschermen bestaan uit miljoenen kleine microcapsules. In elke capsule zit vloeistof met een mengsel van geladen pigmentdeeltjes die reageren op een extern elektrisch veld om een beeld te vormen. Figuur 5.1 illustreert een systeem in twee microcapsules dat bestaat

uit positief geladen witte pigment deeltjes en negatief geladen zwarte in suspensie in een doorschijnende vloeistof. Aan de bovenzijde is de elektrode doorzichtig, onderaan wordt de spanning aangebracht. De waarnemer bekijkt het systeem van bovenaf. Bij een positieve spanning komen de witte deeltjes bovenaan en bedekken alle zwarte deeltjes. De kijker ziet deze plaats als wit. Bij een negatieve spanning komen de zwarte deeltjes bovenaan en worden de witte hierdoor bedekt, waardoor deze plaats als zwart wordt gezien [48].



**Figuur 5.1: Werkingsprincipe van een elektroforetisch systeem.**

Volgens dit principe kan men, met behulp van actieve-matrixaansturing, pixels vormen waarmee tekst en tekeningen weergegeven en bekomt men eigenschappen van bedrukt papier. Eigenschappen zoals een hoge diffuse reflectiviteit, een hoog contrast, een grote kijkhoek en een laag verbruik (dit laatste dankzij bistabiliteit). Momenteel haalt men een resolutie van 96 dpi voor een 3.1 inch beeldscherm. [49]

In tegenstelling tot ionen in vloeibaar-kristallen, zijn de deeltjes in het e-ink systeem voldoende groot om rekening te moeten houden met het volume. We stellen ze voor door bollen met een straal  $r$  ( $r \sim 0.5 \mu\text{m}$ ). Een tweede groot verschil is de valentie  $Z$  van de

geladen bollen, hier varieert  $Z$  van 10 tot 200. De vloeistof waarin de deeltjes bewegen is isotroop.

## 5.2 Basistheorie Elektroforese.

Een uitgebreide theoretische beschrijving van elektroforese valt buiten het kader van deze thesis. Ik zal daarom enkel de basistheorie beschrijven.[50]

De eenvoudigste theoretische benadering van elektroforese is de volgende. Een deeltje onderhevig aan een constante kracht  $\vec{F}$ , heeft in een viskeus medium als limiet- of eindsnelheid (5.1). [51]

$$\vec{v} = \frac{\vec{F}}{f} \quad (5.1)$$

Hierin stelt  $f$  de frictieconstante voor. Met de wet van Stokes kunnen we dit schrijven voor een bol met straal  $a$  wordt de frictieconstante in een medium met viscositeit  $\eta$  als (5.2).

$$f = 6\pi\eta a \quad (5.2)$$

De kracht die het deeltje, met lading  $Q$ , ondervindt is de elektrische kracht (5.3).

$$\vec{F}_E = Q\vec{E} \quad (5.3)$$

De mobiliteit is, in een isotroop medium, de snelheid gedeeld door het elektrische veld, uit (5.1) en (5.3) vinden we (5.4).

$$\mu = \frac{\vec{v}}{\vec{E}} = \frac{Q}{f} \quad (5.4)$$

In deze benadering verwaarlozen we echter het effect van de tegenlading  $-Q$  (deze heeft dezelfde absolute waarde als  $Q$ ). Deze tegenlading is vaak erg dicht bij het oppervlak en omringt het deeltje symmetrisch en hierdoor wordt een dubbellaag gecreëerd. Door hydrodynamische interactie kan er een substantieel deel van deze tegenlading overgedragen worden aan het deeltje. Waardoor de mobiliteit  $\mu$  met één of meerdere grootteordes gereduceerd kan worden. Dit hydrodynamische effect wordt de *elektroforetische vertraging* genoemd.

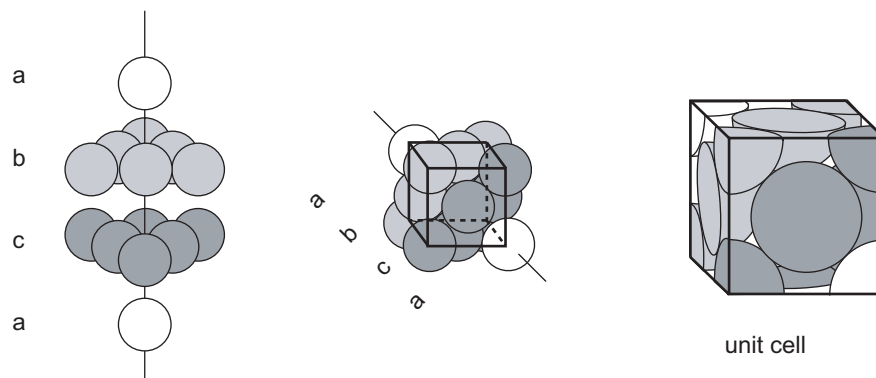
Wanneer er een elektrisch veld wordt aangelegd, bewegen het geladen deeltje en de tegenlading in tegengestelde richting. Hierdoor wordt de symmetrische omringing van de tegenladingen verstoord. Er is een tijd, de relaxatietijd  $\tau$ , nodig om de tegenladingen die weg bewegen van het geladen deeltje te vervangen. Gedurende deze relaxatietijd wordt hierdoor een veld  $\Delta\vec{E}$  gecreëerd dat tegengesteld is aan het aangelegde veld. Dit relaxatieveld  $\Delta\vec{E}$  verlaagt de snelheid van het geladen deeltje. Het *relaxatie effect* is kleiner dan de elektroforetische vertraging, maar kan de mobiliteit verlagen met 10 tot 50% van de originele waarde.

De grote moeilijkheid in de theorie van elektroforese is de correcte beschrijving van deze twee vertragende effecten. Dit valt echter buiten deze thesis. Als benadering van deze vertragende effecten gebruiken we in de simulaties een mobiliteit voor de geladen deeltjes die kleiner is dan deze bekomen met formules (5.2) en (5.4) voor geladen bollen. De mobiliteit van de tegenladingen wordt niet verkleind. In de praktijk gebruiken we hier een waarde die 10% bedraagt van de de mobiliteit voor sferische deeltjes. De juistheid van deze benadering moet nog experimenteel geverifieerd worden. Dit is het onderzoeksdomein van Filip Beunis en Filip Strubbe.

### 5.3 Concentratielimiet Dichtste bolstapeling.

#### 5.3.1 Dichtste bolstapeling.

De geladen pigmentdeeltjes worden voorgesteld als bollen, hierdoor bestaat er een maximale concentratielimiet wanneer deze deeltjes zich in dichtste bolstapeling bevinden. Een hogere concentratie is fysisch niet mogelijk.



**Figuur 5.2: De concentratieberekening voor de dichtste bolstapeling.**

Wanneer de pigmentbollen zich in dichtste bolstapeling bevinden, dan liggen de bollen in lagen op elkaar. In éénzelfde laag is één bol omringd door 6 burens. De lagen liggen onderling ook niet perfect boven elkaar, eigenlijk ligt een bol in elke 4<sup>e</sup> laag exact boven een bol in de eerste laag (ABCABC stapeling). In de linkse tekening van figuur 5.2 kunnen we dit zien. We kiezen de diagonaal van een kubusvormige eenheidscel door een bol in de eerste en de vierde laag (figuur 5.2 midden). De eenheidscel bevat in dichtste bolstapeling 4 bollen. De diagonaal van een zijvlak van deze eenheidscel is vier maal de straal  $r$  van de bollen, zodat we de concentratie  $C_{max}$  van de dichtste bolstapeling kunnen berekenen met (5.5).

$$C_{\max} = \frac{4}{(2\sqrt{2} \cdot r)^3} \quad (5.5)$$

Een alternatieve dichtste bolstapeling is de hexagonale bolstapeling (stapelsequentie ABAB). Deze bezit dezelfde maximale concentratie.

De maximale concentratie door de dichtste bolstapeling is de maximale bovenlimiet voor de concentratie. Het is mogelijk dat deze limiet nog verlaagd wordt, omdat hierin enkel de geometrische beperkingen in rekening werden gebracht. Het is mogelijk dat elektrostatistische afstoting tussen de deeltjes met een zelfde ladingsteken een rol speelt. Experimenten dienen hierover uitsluitsel te geven.

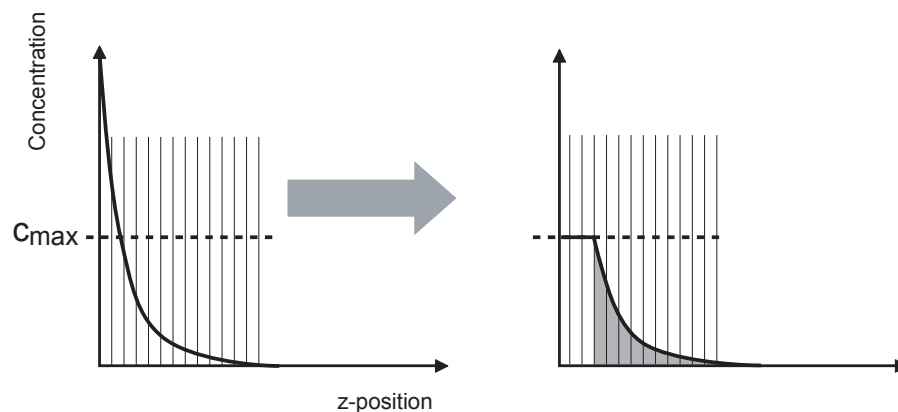
### 5.3.2 Postprocessing concentratielimiet.

We kozen het 2D Monte Carlo algoritme in de continue ruimte als basisalgoritme voor E-ink. Dit algoritme stelt ons in staat het transport te berekenen van deeltjes met sterk verschillende eigenschappen binnen een redelijke rekentijd. De steilheid van de exponentiële distributie hangt, bij een constant veld, af van de valentie  $Z$  (formule (1.40)). Hoe hoger de valentie, hoe steiler de verdeling en hoe meer intervallen we nodig hebben om dit nauwkeurig te beschrijven. De tijdstap wordt bij een FD algoritme bepaald door de snelste deeltjes, de concentratie in een interval mag niet teveel veranderen bij een volgende tijdstap. Het E-ink systeem kan deeltjes met een hoge valentie bevatten, waardoor zeer veel intervallen nodig zijn. Houden we rekening met de tegenladingen, dan is hun mobiliteit 1 à 2 grootteordes groter. Om dit systeem stabiel te simuleren met een FD algoritme wordt de rekentijd om 1 s

te simuleren plots enkele dagen. Terwijl het Monte Carlo algoritme dit in enkele minuten berekent. Uiteraard kunnen ook andere algoritmes gebruikt worden om de rekentijd te reduceren.

Eenmaal de concentratielimiet gekend is, mag deze natuurlijk niet overschreden worden in het simulatiepakket. Vermits we het 2D Monte Carlo algoritme gebruiken, moeten we gebruik maken van postprocessing om de concentratie te limiteren.

In het 2D MC algoritme bewegen de geladen deeltjes als punten in de continue ruimte. Er is behalve een boven- en ondergrens geen positionele beperking. Daarnaast worden de meta-ionen onderverdeeld in 3 regimes die verantwoordelijk zijn voor de positiebepaling van het meta-ion. Elk van de 3 regimes maakt gebruik van een random-estimatorfunctie, waardoor het onmogelijk is te voorspellen welke deeltjes er het dichtst bij een grens zitten. Dit zorgt ervoor dat we de intervallen niet netjes één voor één kunnen opvullen en het grensvlak opschuiven. Daarom kiezen we voor een postprocessing algoritme om de meta-ionen, na de verplaatsing door het algoritme, te herverdelen om op deze manier de concentratielimiet te waarborgen.



**Figuur 5.3: Illustratie van het postprocessing algoritme om de concentratielimiet te waarborgen.**

De werkwijze van het postprocessing algoritme wordt geïllustreerd in figuur 5.3. De nieuwe posities van de meta-ionen worden bepaald door middel van de transportregimes. Om de concentratieverdeling te bekomen, nemen we een histogram van de posities van de meta-ionen. Pas nu kunnen we uitmaken of de maximale concentratielimiet overschreden is of niet. Indien ze overschreden is, treedt het postprocessing algoritme in werking. De meta-ionen worden herverdeeld om opnieuw een consistente verdeling te bekomen. De grensvlakken (zonder concentratielimiet zijn dit de wanden van de structuur) worden naar binnen toe opgeschoven, zodat er geen meta-ionen in de intervallen met maximale concentratie kunnen bijkomen. En de nieuwe verdeling wordt doorgegeven aan het algoritme voor de potentiaalberekening.

Hoewel dit algoritme de deeltjes verplaatst in de continue ruimte, vullen we intervallen op tot aan de concentratielimiet. Dit lijkt contradictoir, maar het begrip concentratie is enkel gedefinieerd in een elk interval. Vandaar ook dat het begrip concentratielimiet enkel van toepassing kan zijn op intervallen. Om de concentratie in de intervallen te bepalen maken we een histogram van de meta-ionposities.

Hoe bepalen we nu het aantal intervallen dat de concentratielimiet bereikt heeft? We tellen de intervallen die een hogere concentratie hebben dan  $C_{max}$ . En laten een beperkt aantal meta-ionen toe in die intervallen. We verplaatsen de grenswand tot na de gelimiteerde intervallen (deze grens kan enkel discrete posities krijgen, enkel de grenzen tussen twee intervallen). En het overschot aan meta-ionen herverdelen we opnieuw volgens een exponentiële verdeling? Dat is een mogelijkheid, maar er zal opnieuw leiden tot een overschrijding van de concentratielimiet, waardoor dit probleem iteratief opgelost moet worden. Bovendien houdt het geen rekening met concentratieoverschrijdingen te wijten aan randomfluctuaties.



Een elegantere oplossing is de volgende. De concentratielimiet wordt overschreden als meta-ionen in het exponentiële regime zitten. We weten hoeveel meta-ionen er in dat regime zitten en we kennen het functieverloop van de exponentiële verdeling waarin ze zitten. Eenmaal  $C_{max}$  overschreden is aan de wand, berekenen we hoeveel meta-ionen er in de exponentieel dalende functie, die start bij het maximum  $C_{max}$  (5.6) zit. Dit wordt in het rechtse concentratie verloop van figuur 5.3 voorgesteld door het grijze gebied.

Let op: Omdat we een functie beschrijven met intervallen zal deze exponentiële dalende functie, één interval volledig gevuld zijn. Bij het nog te bepalen aantal “volle” intervallen moeten we dit volle interval erbij tellen.

$$C_{\max} e^{-\alpha z} \quad (5.6)$$

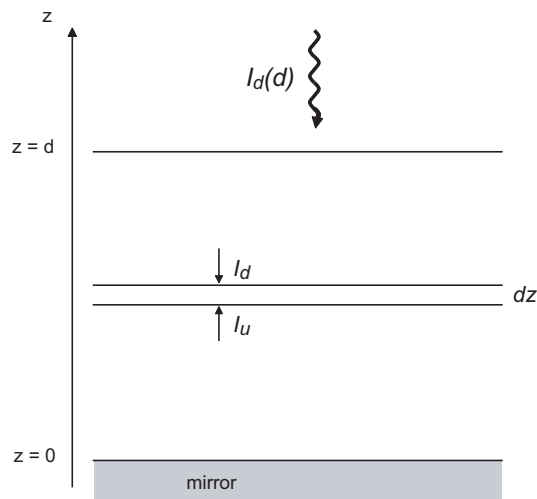
Met het overige aantal berekenen we hoeveel intervallen  $x$  gevuld kunnen worden tot aan  $C_{max}$ . Zodat de exponentiële verdeling opgesplitst kan worden in  $(x+1)$  “volle” intervallen en een exponentiële verdeling vanaf het laatste “volle” interval. De grenswand voor de berekeningen in de volgende tijdstap wordt gezet op de grens van het laatste “volle” interval. Indien er meta-ionen resten worden ook die in de exponentiële verdeling geplaatst. Alle meta-ionen die zitten in een interval dat de concentratielimiet bereikt heeft, worden niet meer verplaatst in de volgende tijdstappen, tot de polariteit van de aangelegde aansturingpuls omkeert.

Ook met deze oplossing bestaat de kans dat de concentratielimiet overschreden wordt na deze herverdeling. Een volgende iteratie kan dit corrigeren. In de praktijk blijkt dit enkel bij zeer hoge beginconcentraties nodig te zijn (20% van  $C_{max}$ ).

## 5.4 Kubelka-Munk reflectietheorie.

Dit hoofdstuk behandelt de simulatie van elektroforetische inkt, een type display met reflectie-eigenschappen die deze van papier benaderen. Vandaar ook de naam *elektronisch papier*. Naast een algoritme om het deeltjestransport te simuleren, is er nog een algoritme nodig om de optische eigenschappen van het elektronische papier te berekenen. Uiteindelijk zijn voor een display de optische eigenschappen het belangrijkste.

De optische reflectie-eigenschappen zullen we berekenen met de Kubelka-Munk reflectietheorie [52]. Dit is een ééndimensionale theorie die oorspronkelijk ontwikkeld werd voor verffilms, maar die ook goed werkt voor papier.



**Figuur 5.4: Conventies voor de Kubelka-Munk reflectietheorie.**

Figuur 5.4 toont de conventies voor de theorie. Het licht valt in op de structuur langs de bovenzijde bij  $z = d$  met een intensiteit  $I_d(d)$ . Het propageert doorheen de structuur waarin het, aan de verschillende lagen, allerlei reflecties en absorptie ondergaat.

Eenmaal bij de onderzijde van de structuur ( $z = 0$ ) aangekomen, kan het licht worden geabsorbeerd of gereflecteerd aan een spiegel (of een wit oppervlak). Het gereflecteerde licht doorkruist de structuur in de omgekeerde richting om uiteindelijk de structuur te verlaten bij  $z = d$  met een intensiteit  $I_u(d)$ . Dit is het gereflecteerde licht.

Licht dat neerwaarts beweegt, duiden we aan met de index “ $d$ ” (down). Licht dat opwaarts beweegt met “ $u$ ” (up). We werken met monochromatisch licht.

We definiëren voor een materiaal dat  $a$  de absorptiecoëfficiënt is, de fractie geabsorbeerd licht per eenheid van dikte, als de dikte nadert naar nul. De reflectiecoëfficiënt  $r$  is de fractie gereflecteerd licht per eenheid van dikte, als de dikte nadert naar nul.

Het effect van een dunne laag, met dikte  $dz$ , op de intensiteiten  $I_d$  en  $I_u$  is het volgende:

- vermindering van  $I_d$  met een term  $I_d \cdot (a+r) \cdot dz$  (absorptie en reflectie)
- vermindering van  $I_u$  met een term  $I_u \cdot (a+r) \cdot dz$  (absorptie en reflectie)
- verhoging van  $I_d$  met een term  $I_u \cdot r \cdot dz$  (gereflecteerd licht van  $I_u$  versterkt  $I_d$ )
- verhoging van  $I_u$  met een term  $I_d \cdot r \cdot dz$  (gereflecteerd licht van  $I_d$  versterkt  $I_u$ )

Zodat we het volgende stel vergelijkingen kunnen opstellen, rekening houdend met de tekenconventie volgens de  $Z$ -as.

$$\begin{cases} dI_u = -(a+r) \cdot I_u \cdot dz + r \cdot I_d \cdot dz \\ -dI_d = -(a+r) \cdot I_d \cdot dz + r \cdot I_u \cdot dz \end{cases} \quad (5.7)$$

Of

$$\begin{cases} \frac{dI_u}{dz} = -(a+r) \cdot I_u + r \cdot I_d \\ \frac{dI_d}{dz} = (a+r) \cdot I_d - r \cdot I_u \end{cases} \quad (5.8)$$

De optische eigenschappen van elke laag worden bepaald door de concentraties van de verschillende deeltjes in elke laag. Elke deeltjessoort  $i$  wordt gekenmerkt door een absorptiecoëfficiënt  $A_i(\lambda)$ , een reflectiecoëfficiënt  $R_i(\lambda)$  en een transmissiecoëfficiënt  $T_i(\lambda)$  voor een golflengte  $\lambda$ . Deze coëfficiënten zijn dimensieloos, de afhankelijkheid tussen deze drie coëfficiënten is (5.9)

$$A_i(\lambda) + R_i(\lambda) + T_i(\lambda) = 1 \quad (5.9)$$

De golflengteafhankelijkheid wordt in een volgende paragraaf verder besproken. Zoals eerder vermeld, werken we in deze theorie monochromatisch.

Om in (5.8) de concentraties in een laag met dikte  $dz$  in rekening te brengen, gebruiken we de volgende afhankelijkheden:

$$a = \sum_i n_i \sigma_i A_i \quad (5.10)$$

$$r = \sum_i n_i \sigma_i R_i \quad (5.11)$$

In (5.10) en (5.11) wordt gesommeerd over alle deeltjessoorten  $i$  met  $n_i$  de concentratie en  $\sigma_i$  de werkzame doorsnede. Op die manier wordt via de concentratie van de deeltjes de optische werking van een laag in rekening gebracht.

In deze ééndimensionale theorie worden de bolvormige pigmentdeeltjes gezien als schijfjes. De eerste benadering van de

werkzame doorsnede is dan ook de oppervlakte van een schijf met straal  $r_i$ ,  $r_i$  is de straal van de bolvormige pigmentdeeltjes.

$$\sigma_i = \pi r_i^2 \quad (5.12)$$

Introduceren we de substitutie (5.13) en houden we rekening met de 2 oplossingen voor  $\alpha$ .

$$\alpha^2 = (a + r)^2 - r^2 \quad (5.13)$$

Dan kunnen we het stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen (5.8) oplossen voor een laag met dikte  $\Delta z$  ( $\Delta z = z_2 - z_1$ ) naar het stelsel (5.14).

$$\begin{pmatrix} I_u(z_2) \\ I_d(z_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \alpha \Delta z - \frac{a+r}{\alpha} \sinh \alpha \Delta z & \frac{r}{\alpha} \sinh \alpha \Delta z \\ -\frac{r}{\alpha} \sinh \alpha \Delta z & \cosh \alpha \Delta z + \frac{a+r}{\alpha} \sinh \alpha \Delta z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_u(z_1) \\ I_d(z_1) \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

In het speciale geval dat er geen absorptie is, is  $a=0$  en is  $\alpha = 0$ . Dan herleidt het stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen (5.8) zich tot (5.15).

$$\begin{cases} \frac{dI_u}{dz} = -r \cdot I_u + r \cdot I_d \\ \frac{dI_d}{dz} = r \cdot I_d - r \cdot I_u \end{cases} \quad (5.15)$$

De oplossing hiervan is (5.16).

$$\begin{pmatrix} I_u(z_2) \\ I_d(z_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - r \Delta z & r \Delta z \\ -r \Delta z & 1 + r \Delta z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_u(z_1) \\ I_d(z_1) \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

Het stelsel (5.16) wordt ook gevonden als men in (5.14) de limiet neemt voor  $\alpha \rightarrow 0$ .

Door gebruik te maken van het stelsel (5.14) (of (5.16) in het geval van geen absorptie) kunnen we met elke laag een matrix definiëren, die afhangt van de concentratie van de deeltjes. De optische eigenschappen van de volledige structuur vinden we door al die matrices te vermenigvuldigen.

We starten de matrixvermenigvuldigingen vanaf de onderzijde bij  $z = 0$ . Dit wil zeggen dat de eigenschappen van de reflector de beginvoorwaarden zijn. Enkele mogelijke beginvoorwaarden staan hieronder:

- Perfecte reflector:  $I_u(0) = -I_d(0)$
- Perfecte absorber:  $I_u(0) = \text{constante}; I_d(0) = 0$
- Halfdoorlaatbare reflector:  $I_u(0) = -x \cdot I_d(0)$

De gereflecteerde lichtfractie  $R_\lambda$  (voor de golflengte  $\lambda$ ) wordt gevonden door  $I_u(d)$  te herschalen op  $I_d(d)$ .

$$R_\lambda = \frac{I_u(d)}{I_d(d)} \quad (5.17)$$

## 5.5 Het reflectiespectrum.

De Kubelka-Munktheorie berekent enkel de reflectie voor één bepaalde golflengte. Over het algemeen zijn de reflectie- en de absorptie-eigenschappen van een materiaal golflengteafhankelijk. Ook het invallende spectrum  $S_{in}(\lambda)$  is niet noodzakelijk uniform.

Het reflectiespectrum kan heel gemakkelijk bepaald worden door het Kubelka-Munk-algoritme uit te voeren voor de verschillende golflengtes. Dit gebeurt door in (5.10) en (5.11) de golflengte afhankelijkheid van de transmissie- en de reflectiecoëfficiënten in rekening te brengen. En door de bekomen coëfficiënt uit vergelijking (5.17) te wegen met het corresponderende gewicht, uit het spectrum, voor de juiste golflengte.

$$S_{refl}(\lambda) = S_{in}(\lambda) \cdot R_{\lambda}(\lambda) \quad (5.18)$$

De coëfficiënt  $S_{int}(\lambda)$  kan de spectrale verdeling zijn [W/nm], maar kan ook herschaald worden op de maximale waarde.

Het reflectiespectrum bevat zeer veel informatie, die we voor deze toepassing niet nodig hebben. Daarom berekenen we de trichromatische coördinaten voor het reflectiespectrum  $S_{refl}(\lambda)$ .

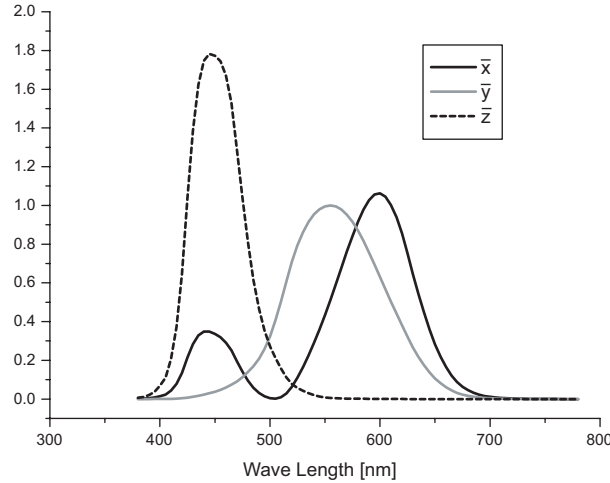
### 5.5.1 CIELAB.

Een spectrum wordt waargenomen als één enkele kleur en kan uitgedrukt worden in trichromatische coördinaten. Om de coördinaten van een kleur te bepalen, dienen we kleurafstemexperimenten uit te voeren. De coördinaten worden bepaald ten opzichte van de kleurafstemfuncties. Om een éénduidig stel coördinaten te bekomen, heeft de CIE in 1931 (Commissie Internationale de l'Eclairage) afspraken gemaakt om een stel standaard kleurafstemfuncties vast te leggen. [53]

Wij zullen het spectrum uitdrukken in de CIE 1976 ( $L^*a^*b^*$ ) standaard, kortweg CIELAB.

Als tussenstap moeten we eerst het spectrum vertalen naar het (X,Y,Z)-systeem. In figuur 5.5 zijn de drie kleurafstemfuncties te

zien voor het  $(X,Y,Z)$ -systeem. Het systeem werd zo gekozen dat de kleurafstemfuncties overal positief zijn en dat de coördinaten van de fysische realiseerbare kleuren positief zijn.



**Figuur 5.5: Standaard CIE (1931) 2° kleurafstemfuncties.**

Om de coördinaten  $(X, Y, Z)$  te bepalen voor een spectrum  $S(\lambda)$ , gebruiken we (5.19) waarin we integreren over het zichtbare deel van het elektromagnetisch spectrum.

$$\begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} = k \int \begin{pmatrix} \bar{x}(\lambda) \\ \bar{y}(\lambda) \\ \bar{z}(\lambda) \end{pmatrix} S(\lambda) d\lambda \quad (5.19)$$

De constante  $k$  wordt voor een reflecterend oppervlak zo gekozen dat  $Y$  de luminantie weergeeft ten opzichte van een perfect diffuus reflecterend wit oppervlak. We vullen deze constante niet in, want we gebruiken de CIELAB standaard.

De CIELAB standaard werd in 1976 geïntroduceerd (samen met CIELUV, die we hier niet zullen beschrijven) met de bedoeling om perceptuele kleurverschillen te bepalen.



Om rekening te houden met de niet-lineaire perceptie van de luminatie wordt  $Y$  vervangen door  $L^*$  (5.20). In  $L^*$  eenheden is 1  $L^*$  een juist merkbaar verschil in lichtheid (Eng. lightness). Dit is de helderheid van het gebruikte oppervlak relatief t.o.v. de helderheid van een wit diffuus oppervlak.

$$L^* = \begin{cases} 116 \left( \frac{Y}{Y_w} \right)^{1/3} - 16; & \frac{Y}{Y_w} > 0.008856 \\ 903.3 \frac{Y}{Y_w}; & \frac{Y}{Y_w} \leq 0.008856 \end{cases} \quad (5.20)$$

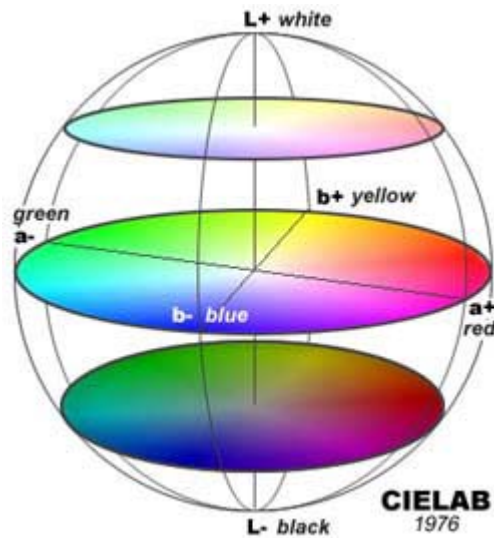
De overige formules zijn:

$$a^* = 500 \left[ \left( \frac{X}{X_w} \right)^{1/3} - \left( \frac{Y}{Y_w} \right)^{1/3} \right] \quad (5.21)$$

$$b^* = 200 \left[ \left( \frac{Y}{Y_w} \right)^{1/3} - \left( \frac{Z}{Z_w} \right)^{1/3} \right] \quad (5.22)$$

Waarin  $a^*$  de coördinaat is langs de rood-groen-as  $a^* \gg 0$  is rood,  $a^* \ll 0$  is groen. En  $b^*$  de coördinaat is langs de geel-blauw-as;  $b^* \gg 0$  is geel,  $b^* \ll 0$  is blauw. Figuur 5.6 toont de kleuren van de CIELAB standaard.

In de formules (5.20), (5.21) en (5.22) zijn  $X_w$ ,  $Y_w$  en  $Z_w$  de coördinaten in het  $(X,Y,Z)$ -systeem voor het referentie-wit, het licht gereflecteerd door een wit diffuus oppervlak. Door telkens de verhouding te gebruiken van de coördinaten van een spectrum t.o.v. die van het referentie-wit, delen we de constante  $k$ , uit (5.19), weg.



Figuur 5.6: kleursysteem van de CIELAB standaard.

In de praktijk gaan we als volgt tewerk. We bepalen de  $X_w$ ,  $Y_w$ ,  $Z_w$  coördinaten door in formule (5.19)  $S_{weight}(\lambda)$  als spectrum te gebruiken. Een perfect wit diffuus oppervlak weerkaatst namelijk het volledige spectrum.

Als reflectiespectrum wordt uiteraard  $S_{ref}(\lambda)$  gebruikt, die via (5.18) bekomen zijn. Zowel  $S_{in}(\lambda)$  als  $S_{ref}(\lambda)$  zijn relatieve spectra, zodat we de  $(X, Y, Z)$ -coördinaten mogen delen door elkaar om de  $L^* a^* b^*$ -coördinaten te berekenen.

## 5.6 Eéndimensionale simulatie.

Het ééndimensionale simulatieprogramma is het meest geschikte algoritme om inzichten te verwerven in deze nieuwe toepassing van geladen-deeltjes-transport.

We simuleren een elektroforetische cel met dikte  $50\ \mu\text{m}$ , de elektroden liggen tegen de capsule die zorgt voor een passieve laag met een dikte van  $100\ \text{nm}$ . In de cel zitten twee soorten geladen pigmentdeeltjes, witte deeltjes met valentie  $Z = +70$  en zwarte deeltjes met valentie  $Z = -70$ . De straal van beiden soorten is  $0.5\ \mu\text{m}$ . De overige simulatieparameters zijn te vinden in tabel 5-1. We simuleren enkel de grote pigmentdeeltjes.

$d_{liq}$	$50\ \mu\text{m}$
$\varepsilon_{liq}$	$2.015$
$\gamma$	$135\ \text{mPa}\cdot\text{s}$
<i>dichtheid</i>	$1500\ \text{kg}/\text{m}^3$
$d_{caps}$	$100\ \text{nm}$
$\varepsilon_{caps}$	$2.0$
<i>Elektrode oppervlak S</i>	$4.0 \times 10^{-5}\ \text{m}^2$
<i>concentratie</i>	$2 \times 10^{16}\ \text{m}^{-3}$
$\mu^{\pm}$	$1 \times 10^{-10}\ \text{m}^2/\text{Vs}$
$Z^{\pm}$	$\pm 70$
$r^{\pm}$	$0.5\ \mu\text{m}$
<i>Aantal Meta-ionen</i>	$50.000$
<i>Aantal intervallen</i>	$2000$
$T$	$298\ \text{K}$
$V_{applied}$	$+ 15\ \text{V}$

Tabel 5-1: De parameterwaarden van de elektroforetische cel simulatie.

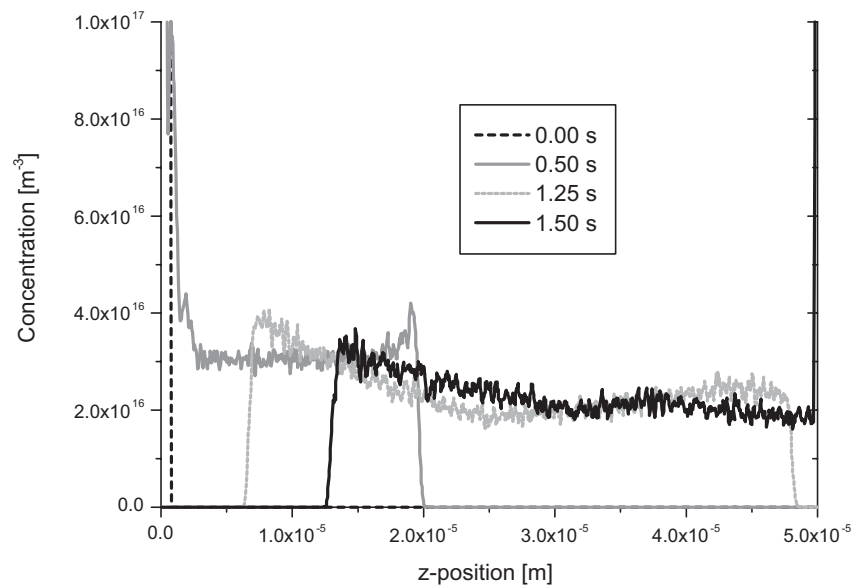
De optische eigenschappen van de pigmentdeeltjes worden perfect ondersteld. Dit wil zeggen dat een voldoende dikke laag witte deeltjes leidt tot een perfecte reflectie en dus alle golflengten voor 100% reflecteert. Analoog is een voldoende dikke laag zwarte deeltjes een perfecte absorber voor alle golflengten. We beschrijven deze structuur met *equal-energy-white*, een spectrum waarin alle golflengten, tussen 380 nm en 780 nm, dezelfde bijdrage hebben.

Vooraleer we beginnen met de simulatie wil ik enkel afspraken maken om problemen met links, onder, rechts en boven de wereld uit te helpen. De volledige structuur wordt  $90^\circ$  in wijzerzin gedraaid. De aanstuurelektrode en de reflectorlaag komen dan op de positie  $z = 0$  te liggen, aan de linker zijde. Het licht dat normaal langs de bovenzijde op de structuur valt, valt nu langs rechts in op de structuur (de waarnemer is dus aan de rechterzijde).

We simuleren het deeltjestransport van de transitie van de zwarte toestand naar de witte toestand door het aanleggen van een positieve spanning van 15 V aan aanstuurelektrode op  $z = 0$ . De zwarte toestand werd bekomen, vertrekkende van een homogene verdeling, door een negatieve spanning van -15 V gedurende 5 s aan te leggen aan de aanstuurelektrode. Hierdoor zijn alle pigmentdeeltjes verzameld, in de dichtste bolstapeling, aan de elektroden. De zwarte deeltjes zijn rechts in de structuur (aan de kant van de waarnemer) en bedekken volledig de witte deeltjes, nabij de linkse elektrode (op  $z = 0$ ). Hierdoor observeert men de elektroforetische cel als “zwart”, vandaar de benaming “zwarte toestand”.

Figuur 5.7 toont het verloop van de witte deeltjes voor vier tijden tijdens deze transitie. Vermits de zwarte deeltjes dezelfde beginverdeling en mobiliteit hebben, gedragen zij zich volkomen analoog, maar hun distributie is gespiegeld volgens de  $z$ -coördinaat.

Bij de “zwarte toestand” zijn de witte pigmentdeeltjes verzameld aan de linkse elektrode (op  $z = 0$ ) in de dichtste bolstapeling.



**Figuur 5.7: De verdeling van de witte pigmentdeeltjes tijdens de transitie van de zwarte naar witte toestand.**

Wanneer de polariteit van het elektrische veld van negatief naar positief wordt veranderd blijven de pigmentdeeltjes blijven bij de linker elektrode in de dichtste bolstapeling. De dikte van de dichtste-bolstapelingslaag vermindert gradueel met de tijd. De pigmentdeeltjes ontsnappen dus geleidelijk uit de dichtste bolstapeling om een brede verdeling te vormen die naar de overzijde (naar rechts) van de cel beweegt. Eenmaal aan de overzijde verdelen de deeltjes zich opnieuw in een dichtste bolstapeling.

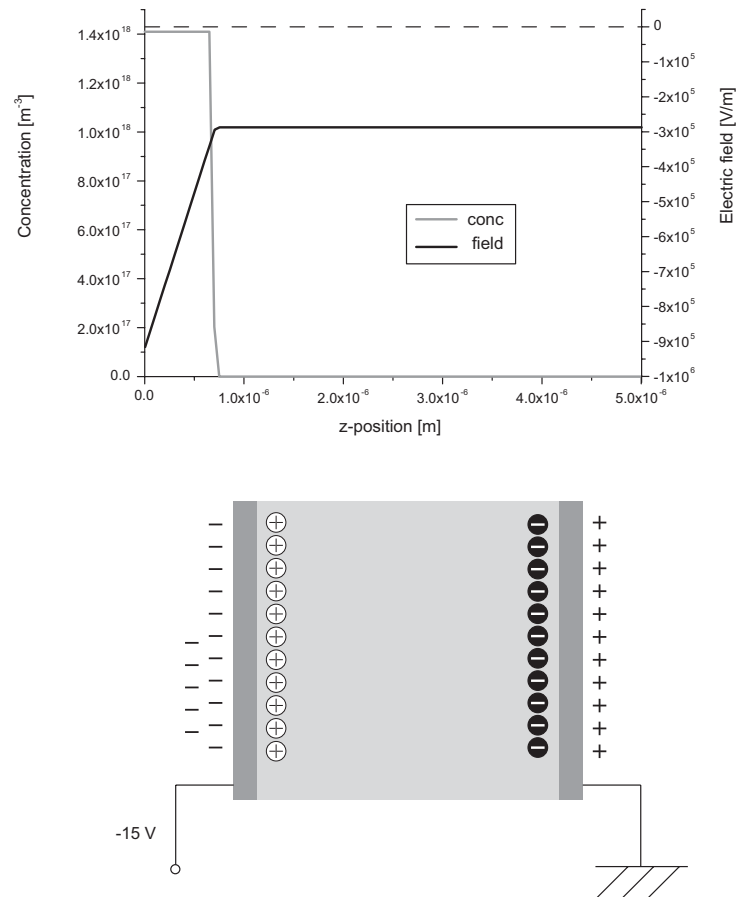
Dit is een interessant fenomeen, want bij voldoende lage ionenconcentratie verwacht men dat alle deeltjes ogenblikkelijk, bij het omkeren van de polariteit van het veld, naar de overzijde bewegen in een verdeling die langzaam spreidt.

Hoe kunnen we dit verklaren? De capsule zorgt voor een isolator tussen de elektrode en de diëlektrische vloeistof, waarin de pigmentdeeltjes bewegen. Wanneer de positieve pigmentdeeltjes tijdens de puls van -15 volt opgestapeld worden aan binnenzijde van de capsule aan de linkerzijde bij  $z = 0$ , worden negatieve ladingen aangevoerd naar de aanstuurelektrode aan de andere zijde van de isolator. Het onderste schema in figuur 5.8 illustreert de aanvoer van lading op de linker elektrode. De lading op de elektrode veroorzaakt door de deeltjes  $Q_e$  is praktisch gelijk en tegengesteld aan de totale lading van de positieve opgestapelde pigmentdeeltjes. De oppervlaktelading  $Q_e$  is in dit geval gelijk aan  $-11.2 \times 10^{-6} \text{ C/m}^2$ . ( $= 8.9 \times 10^{16} \text{ m}^{-3} * 50 \times 10^{-6} \text{ m} * 1.6 \times 10^{-19} \text{ C} * 70$ )

Het aanleggen van de negatieve spanning van  $-15 \text{ V}$  aan de aanstuurelektrode bij  $z = 0$ , zorgt ook voor negatieve ladingen op de aanstuurelektrode. Deze lading kunnen we berekenen met formule (5.23),  $Q_0 = -5.3 \times 10^{-6} \text{ C/m}^2$ , waarin  $C_e = 355 \text{ nF}$  de effectieve capaciteit van de volledige structuur is.

$$Q_0 = C_e V_{\text{applied}} \quad (5.23)$$

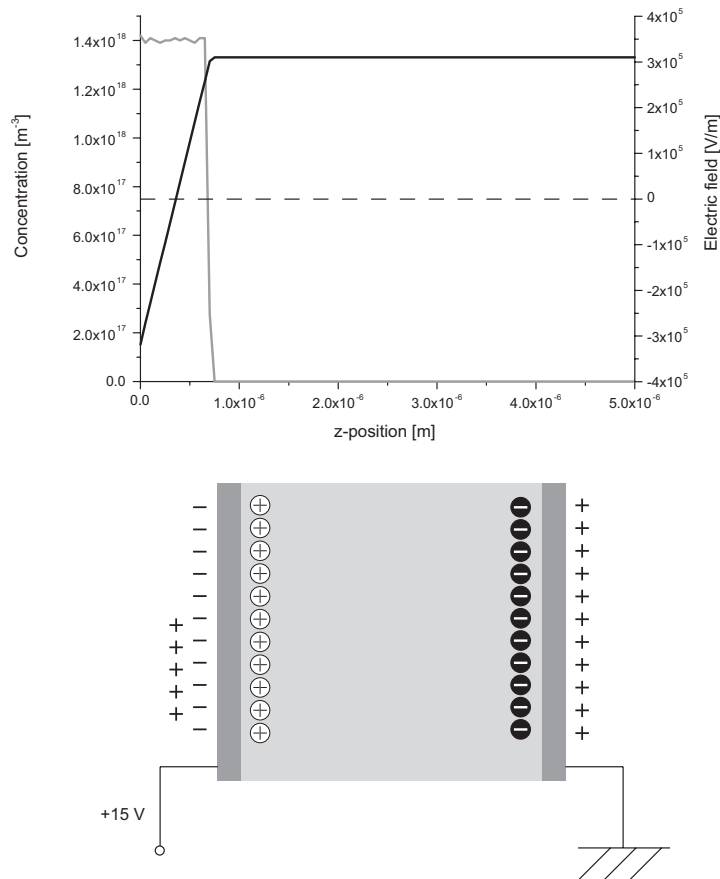
Vlak voor de polariteit van de spanning wordt omgekeerd van negatief naar positief, is de totale lading op de elektrode  $Q_e + Q_0 = (-11.2 - 5.3) \times 10^{-6} \text{ C/m}^2$ . De concentratieverdeling samen met het elektrische veld op dat tijdstip vinden we terug in figuur 5.8 (boven). Het elektrische veld is lokaal, nabij de linker elektrode sterk negatief. Een schets van deze situatie is te zien in de onder in figuur 5.8.



**Figuur 5.8: (boven) concentratieverdeling van de witte pigmentdeeltjes samen met het elektrische veld aan het einde van de negatieve puls. Het elektrische veld is overal negatief. (onder) schematisch overzicht van de situatie.**

Leggen we nu de positieve spanning van +15 V aan op de elektrode bij  $z = 0$ , dan blijft de geïnduceerde lading op de aanstuurelektrode  $Q_e = -11.1 \times 10^{-6} \text{ C/m}^2$ , maar verandert  $Q_0$  naar  $+5.3 \times 10^{-6} \text{ C/m}^2$ . De totale lading op de aanstuurelektrode is nu  $Q_e + Q_0 = (-11.1 + 5.3) \times 10^{-6} \text{ C/m}^2$ , wat nog steeds negatief is! Dit veroorzaakt lokaal een veldinversie. Dit kunnen we zien in de simulatieresultaten in de bovenste grafiek van figuur 5.9.

De helft van de geladen pigmentdeeltjes voelt hierdoor een negatief veld die hen tegen de linker wand houdt. De ander helft voelt een positief veld en beweegt naar de overzijde. De wegbewegende deeltjes verlagen de geïnduceerde lading  $Q_e$  op deze elektrode, waardoor de veldinversie gradueel vermindert in de tijd. Hierdoor kunnen dan meer geladen deeltjes naar de overzijde bewegen.

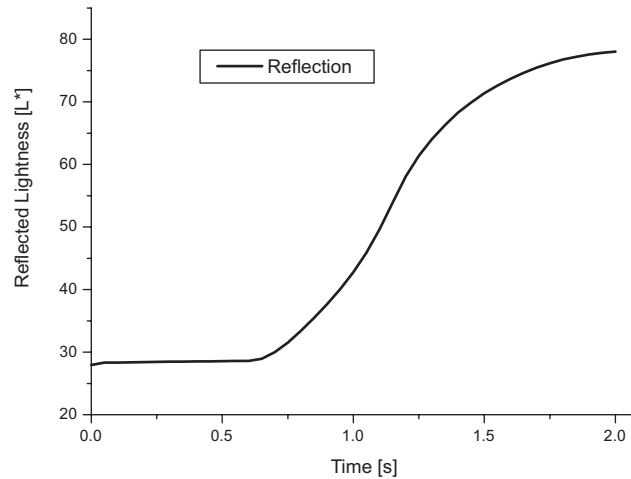


**Figuur 5.9: (boven) concentratieverdeling van de witte pigmentdeeltjes samen met het elektrische veld bij het begin van de positieve puls. (onder) schematisch overzicht van deze situatie.**

De geladen pigmentdeeltjes kunnen dus tijdelijk blijven “plakken” tegen een wand wanneer de polariteit van de elektrode aan deze



wand omgekeerd wordt. Hierdoor worden de dichtste bolstapeling van de deeltjes gradueel afgebouwd. De pigmentdeeltjes bewegen dan in een brede verdeling naar de overzijde (figuur 5.7). [54]



**Figuur 5.10: De gesimuleerde reflectie van de transitie van zwart naar wit.**

In figuur 5.10 zien we de optische reflectie van deze transitie in functie van de tijd. De lichtheid blijft gedurende de eerste 0.5 s constant op  $L^* = 28$  (wat overeenkomt met ~6% reflectie). Daarna stijgt de lichtheid om na 2 s de eindwaarde van  $L^* = 78$  te bereiken (~56% reflectie).

Zolang de concentratiedistributies van de pigmentdeeltjes niet overlappen, stijgt de lichtheid niet. Na ongeveer 0.5 s beginnen de distributies te overlappen waardoor het gereflecteerde licht toeneemt. Doordat de twee distributies van positie verwisselen, komen meer witte pigmentdeeltjes dicht bij de waarnemer die dan ook meer licht kunnen reflecteren. De lichtheid satureert wanneer de distributies niet meer overlappen en alle witte deeltjes dicht bij de waarnemer zijn.

## **5.7 Besluit.**

Onderzoek naar elektroforetische beeldschermen is een nieuw spoor voor de LCD-onderzoeksgroep onder leiding van Prof. Kristiaan Neyts. Dit nieuwe spoor is momenteel een hot-topic in de wereld van vlakke beeldschermen. De ervaring die de LCD-groep heeft opgebouwd rond ionentransport, kan hier gebruikt worden als basis voor elektroforetische beeldschermen. In dit hoofdstuk is slechts een aanzet gegeven met enkele eenvoudige simulaties. Zoals we in dit hoofdstuk kunnen vaststellen, zijn er heel wat meer parameters die nog experimenteel onderzocht moeten worden.

De simulatie in dit hoofdstuk toont de toepasbaarheid aan van het 2D Monte Carlo algoritme. Dit algoritme kan een grote bijdrage leveren in het opstellen van aanstuurschema's voor elektroforetische beeldschermen en kan bovendien gemakkelijk uitgebreid worden naar 2D.

# Hoofdstuk 6

## Besluit

### 6.1 Verwezenlijkingen

Dit doctoraal onderzoek heeft een steentje bijgedragen in de ontwikkeling van nieuwe simulatieprogramma's in meerdere dimensies bruikbaar voor vloeibaar-kristal-onderzoek. Ik zet de verwezenlijkingen hieronder op een rijtje

- *Monte Carlo in de continue ruimte in 1D*: Ik heb deze techniek ontwikkeld en geïmplementeerd om het ionentransport te berekenen in een vloeibaar-kristalbeeldscherm. Deze techniek steunt op de basis transportvergelijking die door Chris Colpaert in 1996 werd opgesteld. Deze techniek is onafhankelijk van de tijdstap, door de posities van de (meta-)ionen in de continue ruimte te gebruiken in plaats van discretisaties, waardoor ze veel sneller is. Dit voordeel speelt een grote rol wanneer ionen gebruik worden met een valentie die sterk uiteen liggen. Bij het traditionele eindige differenties (1D-FD) programma

wordt het aantal onderverdelingen (de resolutie) bepaald door de hoogste valentie, dit bepaalt de steilheid van de exponentiële verdeling aan de wanden. De grootte van de tijdstap is afhankelijk van de snelste deeltjes (hoe sneller de deeltjes, hoe kleiner de tijdstap). De combinatie van hoge valentie en snelle deeltjes leidt dan ook onvermijdelijk tot lange rekentijden. Het Monte Carlo in de continue ruimte algoritme heeft van de tijdstapsbeperking geen last.

- *Monte Carlo in de continue ruimte in 2D:* Het grote voordeel van de Monte Carlo techniek is de eenvoudige uitbreidbaarheid naar meerdere dimensies. Een rechtstreeks gevolg van het niet oplossen van differentiaalvergelijkingen. Ik heb het eendimensionale algoritme uitgebreid naar twee dimensies, door het als een module te ontwikkelen voor een bestaand 2D vloeibaar-kristal-simulatiepakket. Bij mijn weten is dit tweedimensionale ionentransport-algoritme uniek in zijn soort. En wordt er geen onderzoek verricht naar ionaire effecten in 2D bij vloeibaar-kristalbeeldschermen. Dit simulatiepakket is een bijzonder grote troef van de LCD onderzoeksgroep.
- *Monte Carlo op een 3D onregelmatige mesh:* Om onregelmatige geometriën in 3D te kunnen bestuderen heb ik een tweede Monte Carlo algoritme ontwikkeld. Dit algoritme is gesteund op eindige elementen om de rekenruimte in 3D te vullen met tetraëders. De meta-ionen bewegen niet meer in de continue ruimte, maar springen tussen de verschillende hoekpunten van de tetraëders. Ook dit driedimensionale ionentransport algoritme is uniek.
- *Toepassing Elektroforetische beeldschermen:* Naast ionentransport in vloeibare-kristalbeeldschermen, is het Monte Carlo algoritme in de continue ruimte de ideale

kandidaat om een simulatiepakket te ontwikkelen voor elektroforetische beeldschermen. Ik heb dit transportalgoritme dan ook aangepast om elektrisch papier gebaseerd op elektroforese te kunnen simuleren. Elektronisch papier is momenteel een hot-topic, de waarde van een degelijk simulatiepakket is daarom onschatbaar.

## 6.2 Toekomstperspectieven

Het werk beschreven in dit proefschrift is nog niet af. Verschillende benaderingen moeten uitvoerig getest worden met experimenten.

Het 2D Monte Carlo algoritme in de continue ruimte wordt momenteel aangepast door Goran Stojmenovik om lateraal ionentransport in vloeibaar-kristalbeeldschermen te simuleren. Ook het E-inkt programma wordt getest door Filip Strubbe en Filip Beunis. Vermits dit onderzoeksdomein nieuw is voor de LCD-onderzoeksgroep moeten hier alle parameters nog nauwkeurig bepaald worden. Extra effecten kunnen gemakkelijk als extra modules in het model ingepast worden.

Bij het 3D Monte Carlo model om een onregelmatige mesh is een verbeterd driftalgoritme een noodzaak als we dit algoritme wensen te gebruiken voor kwantitatieve vergelijkingen.



## Bibliografie

- [1] R.G. Meyer, L. Lievert, L. Strzelecki, P. Keller, "Ferroelectric LC's", Journal de Physique, Letters 36, (1974) pp. 69-71.
- [2] N.A. Clark, S.T. Lagerwall, "Submicrosecond bistable electro-optic switching in Liquid Crystals", Applied Physics Letters 36, (1980), pp. 899.
- [3] K. D'havé Ph.D. Thesis Universiteit Gent, (2002)
- [4] M. Schadt, "The display with high information content with nematic and ferroelectric liquid crystal displays", Seminar lecture notes SID, (1993)
- [5] H.J. Plach, G. Weber, B. Rieger, "Liquid crystal mixtures for active-matrix displays using new terminally fluorinated compounds", proc. of SID, (1990), pp. 91-94.
- [6] H.J. Plach, E. Bartmaan, E. Poetsch, S. Naemura, B. Rieger, "Broadrange liquid crystal mixtures for active-matrix displays", proc. of SID, (1992), pp. 13-16.
- [7] M. Schadt, "Lineair and non-lineair liquid crystal materials, electro-optical effects and surface interactions", Liquid Crystals vol.14 , (1993)
- [8] L.M. Blinov, "Electro-optical and magneto-optical properties of Liquid Crystals", 2<sup>nd</sup> ed., John Wiley & Sons, New York (USA) (1983)

- [9] P.G. de Gennes, J. Prost, "The Physics of Liquid Crystals", 2<sup>nd</sup> ed., Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford (UK), (1993)
- [10] W. Maier, A. Saupe, 'Eine einfache molekular-statistische Theorie der nematischen kristallinflüssigen Phase Teil I', Z. Naturforsch. A 14A, (1959), pp. 882–889
- [11] C.W. Oseen, "The theory of Liquid Crystals", Transactions of the Faraday Society, vol. 29, (1933), pp. 833
- [12] F. Frank, "On the theory of liquid crystals", Discussions of the Faraday Society, vol. 25, (1951), pp.19-25
- [13] L.M. Blinov, V.G. Chigrinov, "Electro-optic effects in liquid crystals", Springer-Verlag, (1994)
- [14] M. Schadt, W. Helfrich, "Voltage Dependent Optical Activity of a Twisted Nematic Liquid Crystal," Applied Physics Letters, vol. 18, No. 4, (1971), pp. 127-128
- [15] A. Rapini, M. Papoular, "Distorsion d'une lamelle nématique sous champs magnetiques; conditions d'ancrage aux parois", Journal de Physique, vol. 30, (1969), pp. C4-54
- [16] S. Kobayashi, Y. Iimura, M. Nishikawa, "New development in alignment layers for active matrix TN-LCD's", proc. of IDRC, (1994) pp. 78-84
- [17] F. Cuypers, "Simulatie van de evenwichtsoriëntatie in en de optische transmissie van vloeibare-kristalbeeldschermen", PhD thesis aan UG, (1989)
- [18] P. Vetter, "Vloeibare kristallen in kleurenbeeldschermen met actieve matrix", PhD thesis aan UG (1991)
- [19] K. Vermeersch, "Richtingsafhankelijkheid van de optische eigenschappen van vloeibare-kristallagen", PhD thesis UG (2000)



- [20] C.H. Gooch, H.A. Tarry, "The optical properties of Twisted Nematic Liquid Crystal structures with twist angles smaller or equal to  $90^\circ$ ", Journal of Applied Physics, vol. 8, (1975), pp.1575
- [21] H. De Vleeschouwer, H. Zang, "A Simulation Program on Nematic Liquid Crystal Displays", Acomen Gent, (1998), pp. 465-472
- [22] R.C. Jones, "A new calculus for treatment of optical systems", Journal of Optical Society of Amerika, vol. 31, (1941), pp. 488-500
- [23] P. Yeh, "Extended Jones matrix method II", Journal of Optical Society of Amerika, vol. 83, (1993), pp. 966-973
- [24] D.W. Berreman, "Optics in stratified and anisotropic media: 4x4 Matrix Formulation", Journal of Optical Society of Amerika, vol. 62, (1972), pp. 502-510
- [25] P.M. Alt, P. Pleshko, "Scanning limitations of Liquid Crystal Displays", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. ED-21, (1974), pp. 146-155
- [26] B. Maximus, "Uniformiteitsverstoringen in nematische vloeibare-kristalbeeldschermen", Ph.D. Thesis Universiteit Gent, (1996).
- [27] H. Mada, K.Osajima, "Time response of a Nematic Liquid Crystal cell in a switching DC electric field", Journal of Applied Physics, vol. 60, (1986), pp. 3111-3113
- [28] H. Mada, S. Yoshino, "Absorption currents and impurity ions in Nematic Liquid Crystal cells", Japanese Journal of Applied Physics, vol. 27, (1988), pp. L1361-L1364
- [29] H. Mada, "Increasing phenomenon of abnormal absorption current in Liquid Crystal cells", Japanese Journal of Applied Physics, vol. 29, (1990), pp. L123-L125

- [30] C. Colpaert, Geleidingsprocessen in nematische vloeibare kristallen, Ph.D. Thesis Universiteit Gent, (1997).
- [31] H. De Vleeschouwer, "Langetermijnseffecten van Ionentransport en Asymmetrie in Nematische Vloeibare-Kristalbeeldschermen", Ph.D. Thesis Universiteit Gent, (2002).
- [32] G. Stojmenovik, "Equations", intern document LCD onderzoeksgroep, (2003)
- [33] M. Akiyoshi, R. Dunhouse, "LC modes for High-performance monitors", *Information Display* 9/01, (2001), pp. 14-17
- [34] K. Neyts, S. Vermael, C. Desimpel, G. Stojmenovik, A.R.M. Verschueren, D.K.G. de Boer, R. Snijkers, P. Machiels, A. van Brandenburg, "Lateral ion transport in nematic liquid-crystal devices", *J.A.P.*, vol. 94, nr. 6, (2003), pp. 3891-3896
- [35] G. Stojmenovik, K. Neyts, S. Vermael, A. Verschueren, R. van Asselt, C. Desimpel, A. Adamski, "Measurements of lateral ion transport in LCD cells", 19th ILCC conference proceedings, accepted for publication in MCLC (2003)
- [36] W Aspray, "John von Neumann and the origins of modern computing" Cambridge, M., (1990)
- [37] Inleiding tot de statistiek, cursus gedoceerd aan Universiteit Gent door Prof. Steyaert.
- [38] F. Di Pasquale, F.A. Fernández, J.B. Davies and S.E. Day, "2D Finite Element Modelling of Liquid Crystal Materials," in *Proceedings of COMPUMAG'95, IEEE Conference on the Computation of Electromagnetic Fields*, pp. 526-527, Berlin, 10-13 July 1995.

- [39] S. Vermael, K. Neyts, C. Desimpel, D.K.G. de Boer, S.E. Day, F.A. Fernandez P.F. Trwoga and F. Lanowith, "Two-Dimensional Monte-Carlo-based ion transport algorithm in liquid crystals," In Proceedings of IDRC/AD/IDW'01, In Proceedings of the 21st Intl. Display Research Conf. and 8th Intl. Display Workshop, Nagoya, Japan 16-19 Oct. 2001.
- [40] S. Vermael, G. Stojmenovik, C. Desimpel, A. Adamski, K. Neyts, "Ion Currents in In-Plane Switching Liquid Crystal Displays", Proceedings of the 22nd IDRC, Nice (France), (2002), pp. 187-190
- [41] "GiD, Pre and post processing system for F.E.M. calculations.", International Center For Numerical Methods In Engineering (CIMNE), Spain, <http://gid.cimne.com/>
- [42] "GiD *User manual*."
- [43] Numerieke Analyse, cursus gedoceerd aan Universiteit Gent door Prof. Van der Jeugt.
- [44] G.B. Arfken, H.J. Weber, Mathematical methods for Physicists, Fourth Edition, Academic Press, San Diego, 1995.
- [45] S. Ramo, "Currents induced by electron motion," Proc. IRE, vol. 27, pp. 584-585, 1939
- [46] F.A. Fernández, S.E. Day, P. Trwoga, H. Deng and R. James, "Three Dimensional Modelling of Liquid Crystal Display Cells using Finite Elements," Molecular Crystals and Liquid Crystals, vol. 375, pp. 291-299, March 2002
- [47] Fick A., Ann. Physik, Leipzig, 170, pp59, 1855.
- [48] Comiskey, B., Albert, J.D., Jacobson, J., "Electrophoretic ink: A printable display material." SID digest technical papers. 1997. Boston SID., pp.75-76.

- [49] Au J., Chen Y., Ritenour A., Kazlas P., Gates H., "Ultra-Thin 3.1 inch Active-Matrix Electronic Ink Display for Mobile Devices", IDW-02 proceedings, 2002, pp. 223-226.
- [50] Overbeek J.Th.G., Bijsterbosch B.H., "The electrical double layer and theory of Electrophoresis.", Electrokinetic Separation Methods, Elsevier, 1979, pp. 1-32.
- [51] Alonso M., Finn E.J., "Fundamentele Natuurkunde 1, Mechanica", Delta Press, Amerongen, Nederland (1989)
- [52] P. Kubelka, F. Munk, "Ein Beitrag zur Optik der Farbanstriche", Z. Tekn. Physik, 11a, (1931) pp.593-601
- [53] Visualisatietechnologie, cursus gedoceerd aan Universiteit Gent door Prof. P. De Visschere
- [54] S. Vermael, K. Neyts, G. Stojmenovik, F. Beunis, L. Schlangen, "A 1-Dimensional Simulation Tool for Electrophoretic Displays.", Proceedings of 23<sup>rd</sup> IDRC03, Phoenix (USA), (2003), pp. 270-273